

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

ZAVRŠNI RAD

Bruno Pešec

Zagreb, 2012.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

ZAVRŠNI RAD

Mentor:

Prof. dr. sc. Nedeljko Štefanić, dipl. ing.

Student:

Bruno Pešec

Zagreb, 2012.

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći stečena znanja tijekom studija i navedenu literaturu.

Zahvaljujem se mentoru prof. dr. sc. Nedeljku Štefaniću, dipl. ing na omogućavanju izrade ovoga rada. Također se zahvaljujem znanstvenom novaku dr. sc. Hrvoju Cajneru koji je svojim stručnim znanjem i savjetima pomogao u konačnom oblikovanju rada.

Bruno Pešec



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE



Središnje povjerenstvo za završne i diplomske ispite

Povjerenstvo za završne i diplomske ispite studija strojarstva za smjerove:
procesno-energetski, konstrukcijski, brodostrojarški i inženjersko modeliranje i računalne
simulacije

Sveučilište u Zagrebu	
Fakultet strojarstva i brodogradnje	
Datum	Prilog
Klasa:	
Ur.broj:	

ZAVRŠNI ZADATAK

Student:

Mat. br.:

Naslov:

Opis zadatka:

Zadatak zadan:

Rok predaje rada:

Zadatak zadao:

Predsjednik Povjerenstva:

Prof. dr. sc. Mladen Andrassy

Referada za diplomske i završne ispite

Obrazac DS - 3A/PDS - 3A

Sadržaj

Sadržaj	i
Popis slika	iii
Popis tablica	v
Popis oznaka	vi
Sažetak	vii
1 Uvod	1
2 Pokusi sa smjesama	4
2.1 Temeljno ograničenje smjesa	4
2.2 Grafički prikaz smjesa	5
2.2.1 Smjese s dvije komponente	5
2.2.2 Smjese s tri komponente	7
2.3 Smjese s četiri komponente	7
2.4 Planovi pokusa sa smjesama	8
2.4.1 Model simpleks rešetke	9
2.4.2 Model simpleks rešetke s centralnom točkom	9
2.4.3 Model modificirane simpleks rešetke s centralnom točkom	11
2.5 Matematički modeli	11
2.5.1 Model prvog stupnja	12
2.5.2 Model drugog stupnja	12
2.5.3 Model trećeg stupnja	13
3 Programski paketi	14
3.1 Usporedba programskih paketa	15
3.1.1 Korisničko sučelje	15
3.1.2 Dokumentacija	15
3.1.3 Funkcionalnost	16
3.1.4 Fleksibilnost	16
3.1.5 Prikaz rezultata	16

3.1.6	Ocjene kriterija	17
3.2	Numerički primjeri	17
3.2.1	Uže od polimera	17
3.2.2	Vlačna čvrstoća nodularnog lijeva	18
3.3	Zaključak usporedbe	19
4	Algoritam	24
4.1	Razvoj algoritma	24
4.1.1	Ulazni podaci	25
4.1.2	Odabir matematičkog modela	25
4.1.3	Formiranje matrice stanja pokusa	26
4.1.4	Analiza varijance	26
4.1.5	Proračun koeficijenata b	27
4.1.6	Oblikovanje grafičkog prikaza	27
4.1.7	Izlazni podaci	28
4.2	Primjena algoritma	29
5	Zaključak	34
	Literatura	36
	Prilozi	37
A	MATLAB programski kod algoritma	38
B	Ulazni podaci za programske pakete	43
B.1	Design-Expert	43
B.2	JMP	44
B.3	Minitab	44
C	Izlazni podaci za programske pakete	45
C.1	Design-Expert	45
C.2	JMP	55
C.3	Minitab	57

Popis slika

1.1	Opći model prikaza procesa ili sustava	2
2.1	Grafički prikaz u kartezijevom koordinatnom sustavu	6
2.2	Prikaz segmenta \overline{AB}	6
2.3	Prikaz smjese s dvije komponente pomoću pravca	6
2.4	Prikaz smjese s tri komponente pomoću jednakokraničnog trokuta	7
2.5	Prikaz smjese s četiri komponente pomoću tetraedra	8
2.6	Simpleks rešetka s tri čiste komponente	9
2.7	Simpleks rešetka s tri čiste komponente i tri pola/pola smjese dviju kom- ponenata	10
2.8	Simpleks rešetka s tri čiste komponente, tri pola/pola smjese dviju kom- ponenata i centralnom točkom	10
2.9	Modificirana simpleks rešetka s tri čiste komponente, tri pola/pola smjese dviju komponentata i centralnom točkom	11
3.1	Dio proizvodnog programa ljevaonice Duga Resa d.o.o.	19
3.2	Primjer 1., konturni prikaz odziva, odziv u kp	20
3.3	Primjer 1., trodimenzionalni prikaz odziva, odziv u kp	21
3.4	Primjer 2., konturni prikaz odziva, odziv u N/mm^2	22
3.5	Primjer 2., trodimenzionalni prikaz odziva, odziv u N/mm^2	23
4.1	Blok struktura algoritma	25
4.2	Prikaz oblikovanja matrice odziva	28
4.3	Dvodimenzionalni prikaz točaka pokusa	29
4.4	Dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkci- jom, primjer 1.	30
4.5	Dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkci- jom, primjer 2.	30
4.6	Trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkci- jom, primjer 1.	31
4.7	Trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkci- jom, primjer 2.	31
4.8	Dvodimenzionalni konturni prikaz odziva, primjer 1., odziv u kp	32
4.9	Dvodimenzionalni konturni prikaz odziva, primjer 2., odziv u N/mm^2	32

4.10	Trodimenzijski prikaz odziva, primjer 1., odziv u kp	33
4.11	Trodimenzijski prikaz odziva, primjer 2., odziv u N/mm^2	33
B.1	Ulazne matrice	43
B.2	Ulazne matrice	44
B.3	Ulazne matrice	44
C.1	Izlazni podaci za primjer 1.	55
C.2	Izlazni podaci za primjer 2.	56

Popis tablica

2.1	Pregled matematičkih modela	11
3.1	Pregled programskih paketa za planiranje pokusa	14
3.2	Ocjene kriterija	17
3.3	Točke pokusa i odzivne vrijednosti	18
3.4	Koeficijenti i njihova vrijednost u odgovarajućem paketu	18
3.5	Točke pokusa i odzivne vrijednosti	19
3.6	Koeficijenti i njihova vrijednost u odgovarajućem paketu	19
4.1	Prikaz ulaznih datoteka	26
4.2	Koeficijenti izračunati pomoću algoritma	29

Popis oznaka

Oznaka	Mjerna jedinica	Značenje
x_i		nezavisna varijabla
y_i		zavisna varijabla
z_q		varijable poremećaja
\bar{y}		aritmetička sredina odziva (y)
R_m	$[N/mm^2]$	vlačna čvrstoća
\mathbf{X}		matrica oblika
\mathbf{b}		matrica koeficijenata
S_{yy}		ukupna suma kvadrata odstupanja
SS_R		suma kvadrata odstupanja regresijskog modela
SS_E		suma kvadrata odstupanja ostataka

Sažetak

Porastom potrebe za primjenom metodologije planiranja i analize pokusa porasla je i potreba za odgovarajućim programskim paketima. Kako bi se pokusi izvodili efikasno odgovarajući programski paketi neophodan su alat.

Razvoj komercijalnih programskih paketa okrenut je zadovoljavanju potreba industrijskog sektora, koji rijetko zahtjeva nestandardne planove pokusa. Naspram toga, znanstveno istraživački rad zahtjeva veći stupanj slobode u pristupu oblikovanja samih modela i planova pokusa.

U radu je razrađen algoritam za planiranje i analizu pokusa sa smjesama za probleme niže kompleksnosti. Pri oblikovanju algoritma posebna pozornost posvetila se robusnosti i po-općenju kako bi algoritam bio nadogradiv daljnjim intervencijama.

Teorija je obrađena u prvom dijelu rada i uključuje modele pokusa sa smjesama, njihove matematičke zapise i odgovarajuće grafičke prikaze.

Drugi dio rada sadrži usporedbu najznačajnijih programskih paketa koji se bave problemom pokusa sa smjesama. Sastavljen je popis kriterija i odabrana su dva primjera iz prakse kako bi se mogli usporediti rezultati.

Treći dio rada razrađuje koncept i razvoj algoritma, te njegovu primjenu i usporedbu dobivenih vrijednosti s vrijednostima dobivenih pomoću komercijalnih programskih paketa.

Ključne riječi: planiranje pokusa; planiranje i analiza pokusa; pokusi sa smjesama; pokusi s mješavinama; smjese; mješavine; programski paketi za planiranje i analizu pokusa sa smjesama; MATLAB

Poglavlje 1

Uvod

Pokusi se izvode u praktički svim područjima industrije te također u znanstveno istraživačke svrhe, s ciljem otkrivanja informacija u vezi nekog procesa ili sustava. Doslovno, pokus je test. Formalnije, pokus možemo definirati kao test ili niz testova u kojima se kontrolirano mijenjaju vrijednosti ulaznih veličina kako bi se otkrili razlozi promjena iz očitavanja vrijednosti izlaznih veličina. Hrvatska opća i nacionalna online enciklopedija [1] pokus definira na slijedeći način:

Eksperiment (lat.) ili pokus, postupak izazivanja neke pojave u kontroliranim uvjetima, radi znanstv. opažanja i istraživanja; može se ponavljati u različitim, promjenjivim uvjetima. E. je najvažnije metodičko pomagalo u kvalitativnim i egzaktno-kvantitativnim analizama; u svakoj znanosti ima specifične mogućnosti i granice; u znanstv. istraživanje uveden u XVII. st. (F. Bacon, G. Galilei).

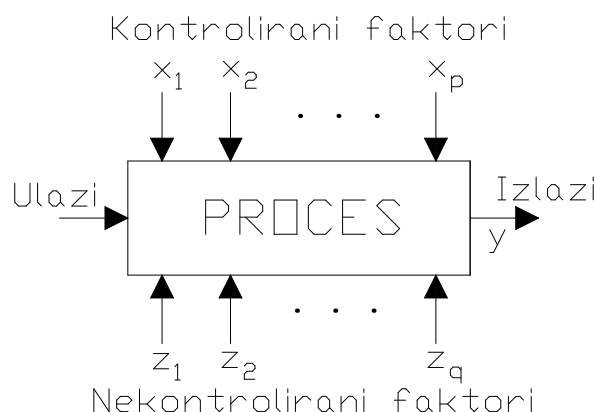
U strojarstvu izvođenje pokusa ima značajnu ulogu u razvoju novih proizvoda, unaprjeđenju postojećih proizvoda i unaprjeđenju proizvodnih procesa. U većini slučajeva cilj je razviti robustan proces, tj. proces na koji minimalno utječu vanjske promjene. Poopćeno, pokusi se koriste kako bi se proučile performanse procesa i sustava. Rezultati pokusa i zaključci koji se mogu polučiti uvelike ovise o tome na koji načini su podaci sakupljeni.

Proces ili sustav vizualno se predstavlja pomoću "crne kutije" (slika 1.1), npr.: strojevi, ljudi, procesi, itd., koja transformira ulazne varijable u izlazne. Ulazne varijable mogu biti materijal, rad, energija, a izlazne proizvod, poluproizvod, usluga, itd. Ulazne varijable dijelimo s obzirom na to može li se utjecati na njih ili ne, dakle na "kontrolirane faktore" x_1, x_2, \dots, x_p i "nekontrolirane faktore" (tzv. poremećaji) z_1, z_2, \dots, z_q .

Glavni ciljeva pokusa su [2]:

1. Određivanje varijable koja najviše utječe na izlazne varijable
2. Definiranje nezavisnih varijabli, tako da je zavisna varijabla (y) gotovo uvijek u željenom intervalu
3. Definiranje nezavisnih varijabli, kako bi se smanjila varijanca odziva vrijednosti y -a

4. Definiranje nezavisnih varijabli, tako da nekontrolirani faktori minimalno utječi na y



Slika 1.1: Opći model prikaza procesa ili sustava

Opći pristup planiranju i provođenju pokusa naziva se "strategija eksperimentiranja". Postoji nekoliko strategija:

- pristup nagađanja
- pristup faktor po faktor
- faktorski pokusi
 - 2^2 faktorski plan, 2^3 faktorski plan, \dots , 2^k faktorski plan
 - djelomični faktorski pokusi
 - metodologija odzivne površine
- pokusi sa smjesama

Statističko planiranje pokusa odnosi se na proces planiranja pokusa tako da se odgovarajući podaci sakupe odgovarajućim statističkim metodama i da se podvrgnu odgovarajućoj statističkoj analizi, u svrhu dobivanja valjanih rezultata na temelju kojih možemo donijeti objektivne odluke. Dakle, svaki problem planiranja pokusa ima dva aspekta: sam plan pokusa i statistička analiza podataka. Ta dva problem usko su povezana, zbog adekvatnosti upotrebe analize.

Tri osnovna principa planiranja pokusa su: repliciranje (ponavljanje pokusa), slučajnost i blokiranje [2].

Repliciranje (ponavljanje pokusa) omogućuje dobivanje procjene eksperimentalne greške. Ta procjena postaje osnovna mjerna jedinica prema kojoj određujemo jesu li promatrane promjene vrijednosti zaista statistički različite. Ukoliko se koristi aritmetička sredina (npr., \bar{y}) za procjenu pojedinih faktora u pokusu, repliciranje omogućuje precizniju procjenu. Postoji razlika između repliciranja i repeticije mjerenja. Repliciranjem potencijalno možemo odrediti izvor varijabilnosti i između pokusa i unutar pokusa.

Slučajnim rasporedom faktora i redoslijeda izvođenja pokusa osiguravamo neovisnu distribuciju izlaznih varijabli i grešaka, te smanjenje utjecaja faktora koji se ne mogu kontrolirati.

Blokiranje je tehnika kojom možemo povećati preciznost usporedbe faktora. Također se koristi kada želimo smanjiti i eliminirati utjecaj tzv. smetnji, tj. onih faktora koju utječu na odziv pokusa no ne zanimaju nas. Općenito, blok je skup relativno homogenih pokusnih uvjeta.

Poglavlje 2

Pokus sa smjesama

U klasičnim pokusima (poput prethodno spomenutih pokusa), svi faktori su nezavisni. To znači da je moguće slobodno odabrati razinu faktora bez obzira na razine ostalih faktora. Na primjer, nakon odabira razine prva tri faktora u faktorskom pokusu 2^4 , razinu četvrtog faktora moguće je odabrati bez ikakvih ograničenja. Takva sloboda odabira nije moguća u pokusima sa smjesama, zato što su faktori sastavni dio smjese. Suma udjela svih faktora uvijek mora iznositi 100%, što znači da faktori nisu zavisni jedan o drugome.

Pokus sa smjesama prikladni su kada odziv ovisi o udjelu komponenata u smjesi a ne o količini komponenata. Na primjer, recepti koktela se obično zapisuju kao omjer sastojaka. Ukoliko bi se željelo unaprijediti taj koktel tada bi se variralo udjelima komponenata i to bi bio pokus sa smjesom.

Smjesa ili mješavina sustav je dviju ili više određenih kemijskih tvari u kojem nema preraspodjele valentnih elektrona, pa svaka sastavnica zadržava svoja svojstva. U homogenim smjesama atomi ili molekule međusobno su pomiješani, a heterogene smjese imaju prepoznatljive faze [3]. Hrvatska opća i nacionalna online enciklopedija [1] pokus definira na slijedeći način:

Smjesa, mješavina dviju ili više kemikalija koje i nakon miješanja zadržavaju svoja karakteristična svojstva. Za razliku od kem. spoja, s. se može rastaviti u komponente fizikalnim metodama (filtracijom, destilacijom, otparavanjem, kristalizacijom). Homogene smjese, homogene tvari sastavljene od smjese čistih tvari, npr. otopina šećera (s. vode i šećera), ili benzin (s. raznih ugljikovodika), te čvrste ili kristalne otopine, npr. čvrsta otopina selena u sumporu ili čvrsta otopina srebra u zlatu (zlato za nakit). Plinske smjese također mogu biti homogene smjese (zrak koji je ugl. smjesa dušika i kisika). Heterogene smjese, tvari sastavljene od međusobno odijeljenih djelića homogenih tvari (npr. kamen granit sastavljen od tvrdih kristalića kremena, sjajnih ljuščica tinjca i bijelih kristalića glinenca).

2.1 Temeljno ograničenje smjesa

Razmotrimo smjesu sa n komponenata. Prva komponenta zauzima određeni postotak smjese. Druga komponenta smjese zauzima neki drugi postotak smjese. Nastavimo li tako

dalje, svaka komponenta ima neki određeni udio smjese. Sve te komponente tvore smjesu i njihova suma mora iznositi 100%. Ukoliko su određeni omjeri prvih $n - 1$ komponenti, tada omjer $n - te$ komponente ne može biti slobodno odabran, već je određen [4].

Ukoliko sa x_i označimo postotak udjela komponente i , suma svih komponenata mješavine je određena slijedećim odnosom:

$$\sum_{i=1}^n x_i = 100\% \quad (2.1)$$

Udio svake komponente nalazi se unutar 0% i 100%. Povećanjem udjela neke komponentne rezultira smanjenjem udjela drugih komponenata, tako da suma svih komponenata i dalje iznosi 100%.

Možemo primijeniti i drugi zapis, zamijenivši 100% sa 1, što nam daje slijedeći zapis:

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (2.2)$$

Ovaj odnos zovemo temeljnim ograničenjem smjesa.

2.2 Grafički prikaz smjesa

Grafički se mogu prikazati smjese s dvije, tri i četiri komponente. Smjese s više od četiri komponente prikazuju se preko tablica i matematičkih zapisa.

2.2.1 Smjese s dvije komponente

Smjese s dvije komponente možemo još nazivati binarnim ili dvojnim smjesama. Pretpostavimo da je udio prve komponente x_1 a udio druge komponente x_2 . Za prikaz u kartezijevom sustavu, os Ox_1 je ortogonalna osi Ox_2 (slika 2.1). Osi idu od 0,00 do 1,00. Smjesa koja sadrži udio x_a komponente A i udio x_b komponente B nalazi se na presjecištu koordinata x_a i x_b . Ta točka odgovara toj specifičnoj smjesi i zove se točka smjese ili jednostavno točka.

Temeljno ograničenje smjesa dodaje odnos između x_a i x_b :

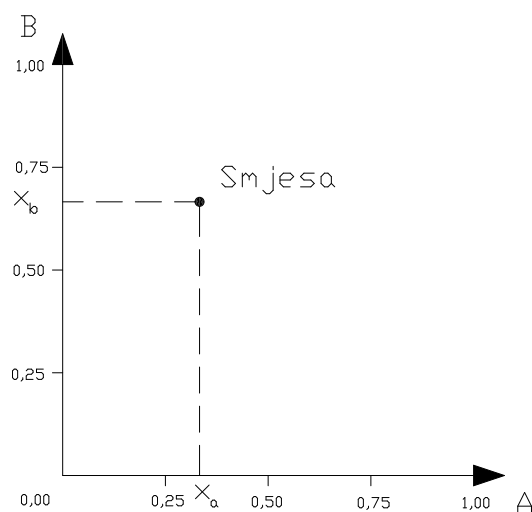
$$x_a + x_b = 1$$

To možemo zapisati na slijedeći način:

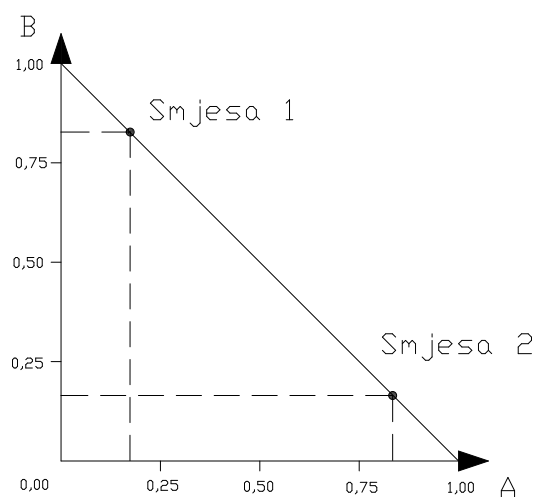
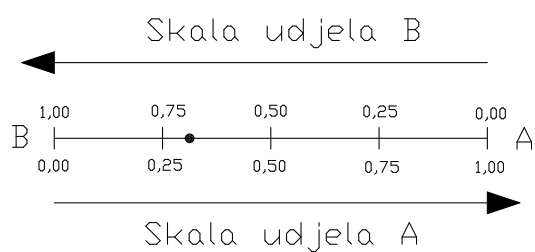
$$x_b = -x_a + 1$$

Iz ovog zapisa može se vidjeti da sva presjecišta koordinata x_a i x_b leže na pravcu koj spaja (1,0) i (0,1) (slika 2.2). Budući da suma udjela uvijek mora iznositi jedan, samo nam je taj segment koristan, te možemo odbaciti osi Ox_1 i Ox_2 . Zbog toga smjese s dvije komponente možemo prikazati kao pravac (slika 2.3).

Točka na slici 2.3 predstavlja točku smjese i očitava se tako da se svaki udio očitava sa odgovarajuće skale. U ovom slučaju očitavamo da udio komponente A iznosi 0,3 (30%)



Slika 2.1: Grafički prikaz u kartezijevom koordinatnom sustavu

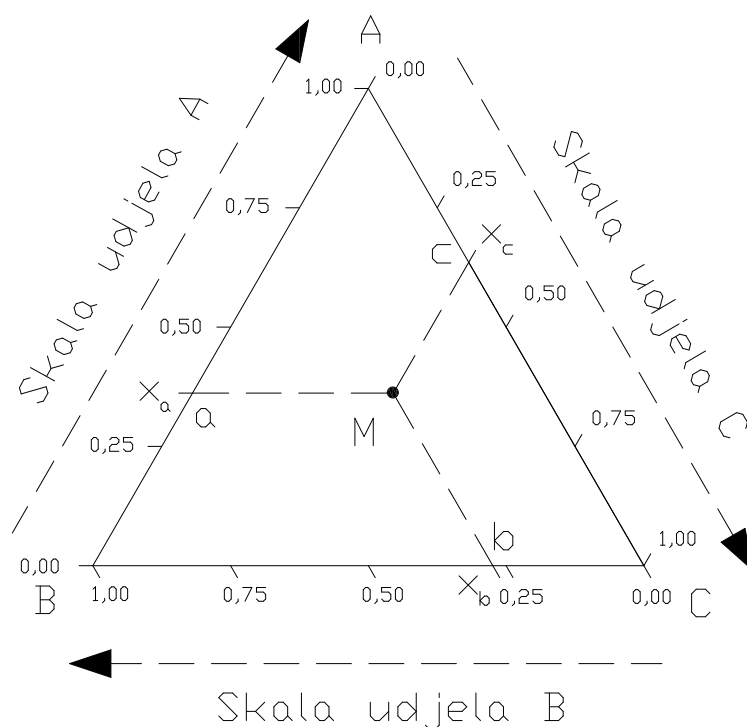
Slika 2.2: Prikaz segmenta \overline{AB} 

Slika 2.3: Prikaz smjese s dvije komponente pomoću pravca

a komponente B 0,7 (70%). No i kada bismo imali samo jednu skalu mogli bismo očitati oba udjela zbog temeljnog ograničenja smjese.

2.2.2 Smjese s tri komponente

Smjese s tri komponente se nazivaju ternarnim ili trojnim smjesama. Ternarne smjese prikazujemo jednakostraničnim trokutom (slika 2.4). U vrhovima trokuta nalaze se čisti udjeli a na stranicama trokuta nalaze se binarne smjese. Udio komponente A očitavamo na stranici \overline{AB} , udio komponente B na stranici BC a udio komponente C na stranici AC. Točke koje se nalaze unutar trokuta predstavljaju ternarnu smjesu čiji se udjeli očitavaju sa stranica.



Slika 2.4: Prikaz smjese s tri komponente pomoću jednakostraničnog trokuta

Udjeli komponentata mogu se očitati na slijedeći način:

$$\begin{aligned} bM &= Ba = \text{udio komponente A u smjesi M} \\ cM &= Cb = \text{udio komponente B u smjesi M} \\ aM &= Ac = \text{udio komponente C u smjesi M} \end{aligned}$$

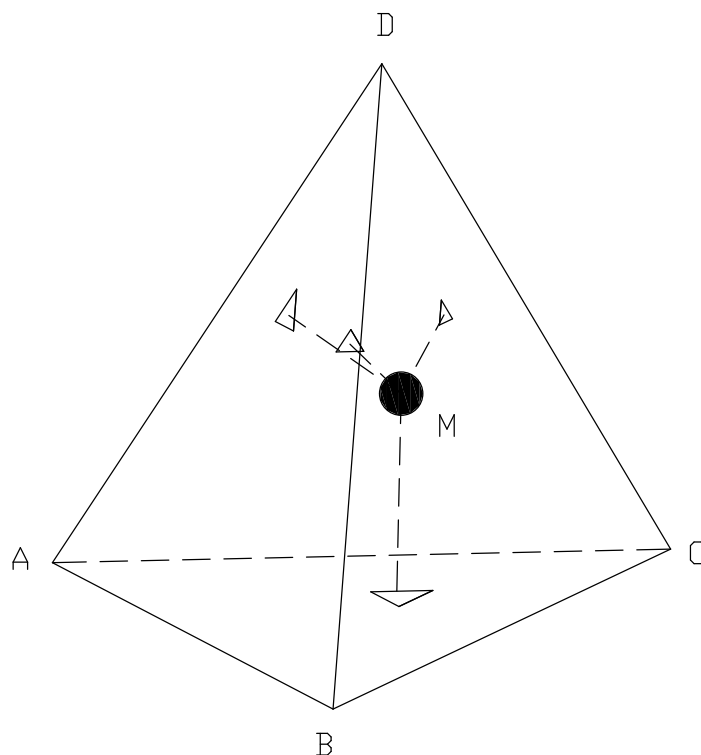
Geometrijske karakteristike jednakostraničnog trokuta osiguravaju da prethodno navedeni odnosi zadovoljavaju temeljno ograničenje smjesa.

$$Ma + Mb + Mc = Ac + Ba + Cb = AB = AC = BC = 1$$

2.3 Smjese s četiri komponente

Smjese s četiri komponente prikazuje tetraedrom (slika 2.5). U vrhovima tetraedra nalaze se čisti udjeli, na stranicama nalaze se binarne smjese a na površinama jednakostranič-

nih trokuta nalaze se ternarne smjese. Točke unutar tetraeda predstavljaju kvaternarnu smjesu.



Slika 2.5: Prikaz smjese s četiri komponente pomoću tetraedra

2.4 Planovi pokusa sa smjesama

Za standardne planove pokuse sa smjesama pretpostavljamo da za čiste komponente¹ vrijede jednaka pravila kao i za smjese, te da ne postoje ograničenja na sadržaj smjese (izuzev temeljnog ograničenja smjesa).

Planove klasificiramo s obzirom na smještaj točaka smjese:

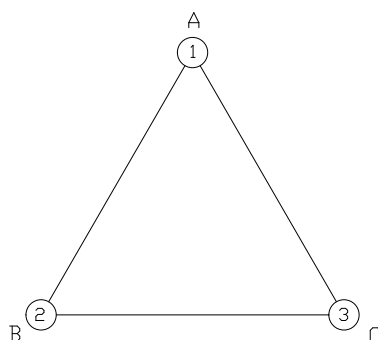
- model simpleks rešetke
- model simpleks rešetke s centralnom točkom
- model modificirane simpleks rešetke s centralnom točkom

¹Pod pojmom čista komponenta podrazumijeva se točka smjese koja ima 100% udjela određene komponente dok svi ostali udjeli iznose 0%.

2.4.1 Model simpleks rešetke

Povijesno gledano, model simpleks rešetke za plan pokusa sa smjesama prvi je razvijen [9]. Točke smjese udaljene su za jednake vrijednosti, tj. istim korakom. Simpleks rešetka za ternarnu smjesu sadrži tri točke koje se nalazi u vrhovima trokuta, tj. tri čiste komponente (slika 2.6), te korak u tom slučaju iznosi 1.

Rešetka se proširuje ubacivanjem točaka koje sadrže 50% dviju komponenata i 0% jedne komponente (slika 2.7). Korak u tom slučaju iznosi $1/2$. Daljnjim ubacivanjem točaka korak se smanjuje na $1/3$, $1/4$, \dots , $1/m$. Pomoću koraka $1/m$ određujemo gustoću rešetke.



Slika 2.6: Simpleks rešetka s tri čiste komponente

Za brži opis i korištenje služi se zapis $\{q, m\}$, gdje q predstavlja broj komponenti a m je varijabla kojom određujemo rešetku. Slijedeći tu logiku plan na slici 2.7 označava se $\{3, 2\}$. Broj točaka smjese računamo pomoću sljedeće jednadžbe:

$$C_{q+m-1}^m = \frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!} \quad (2.3)$$

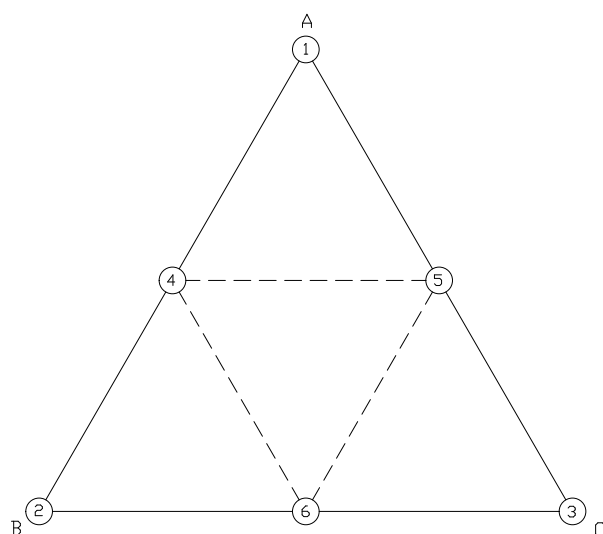
Valjanost jednadžbe provjeriti ćemo na primjeru sa slike 2.7.

$$\begin{aligned} C_{3+2-1}^2 &= \frac{(3+2-1)!}{2!(3-1)!} \\ C_4^2 &= \frac{4!}{2!2!} \\ C_4^2 &= 6 \end{aligned}$$

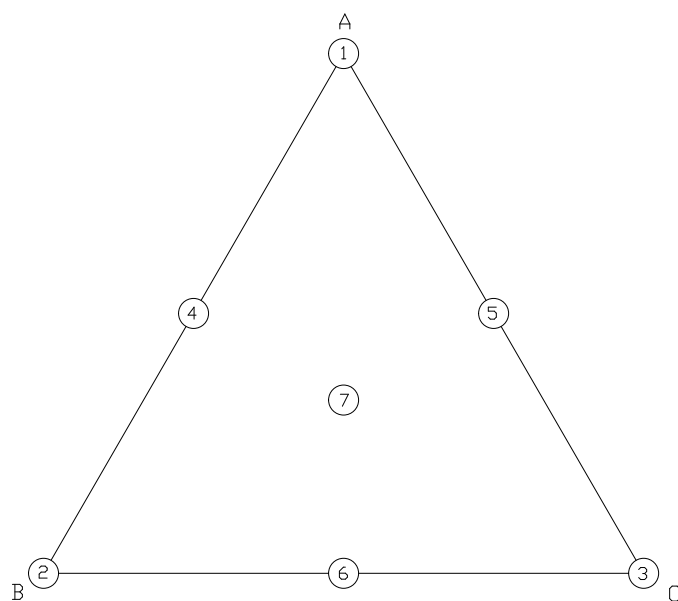
2.4.2 Model simpleks rešetke s centralnom točkom

Uvođenjem središnje točke u simpleks rešetku dobivamo model simpleks rešetke s centralnom točkom. Ta točka predstavlja smjesu koja se sastoji od jednakih udjela svih komponenata. Na primjer, za ternarnu smjesu bi udjeli komponenata iznosili $1/3$. Broj točaka potrebnih za proučavanje ovakvog modela računamo pomoću slijedeće jednadžbe:

$$N = 2^q - 1 \quad (2.4)$$



Slika 2.7: Simpleks rešetka s tri čiste komponente i tri pola/pola smjese dviju komponentata



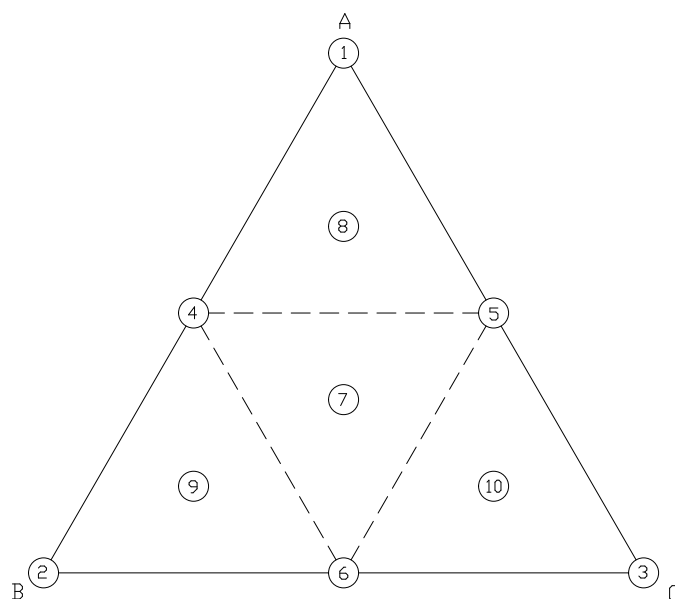
Slika 2.8: Simpleks rešetka s tri čiste komponente, tri pola/pola smjese dviju komponentata i centralnom točkom

Broj točaka za proučavanje modela na slici 2.8 iznosi:

$$\begin{aligned} N &= 2^3 - 1 \\ N &= 7 \end{aligned}$$

2.4.3 Model modificirane simpleks rešetke s centralnom točkom

Uvođenjem centralnih točaka u pod-rešetke glavne simpleks rešetke tvori se modificirani model simpleks rešetke s centralnom točkom (slika 2.9). Ukoliko se planu $\{3, 2\}$ (slika 2.7) pridoda centralna točka dobiva se simpleks rešetka s centralnom točkom (slika 2.8). Pod-rešetke tvore trokuti $\triangle(1, 4, 5)$, $\triangle(4, 2, 6)$, $\triangle(5, 6, 3)$ i $\triangle(4, 5, 6)$. Pod-rešetka $\triangle(4, 5, 6)$ je već popunjena centralnom točkom glavne rešetke (točka 7), te se ne popunjava novom točkom. Ostale pod-rešetke popunjavaju se točkama smještajući ih u težište trokuta.



Slika 2.9: Modificirana simpleks rešetka s tri čiste komponente, tri pola/pola smjese dviju komponentata i centralnom točkom

2.5 Matematički modeli

Tablica 2.1: Pregled matematičkih modela [4]

Naziv modela	Stupanj modela	Matematički model
Linearni	1.	$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$
Kvadratni	2.	$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3$
Puni kubni	3.	$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \dots$ $\dots + b'_{12}x_1x_2(x_1 - x_2) + b'_{13}x_1x_3(x_1 - x_3) + \dots$ $\dots + b_{23}x_2x_3(x_2 - x_3) + b_{123}x_1x_2x_3$
Ograničeni kubni	3.	$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \dots$ $\dots + b_{123}x_1x_2x_3$

2.5.1 Model prvog stupnja

Polinom za smjesu koja sadrži tri nezavisne komponente:

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 \quad (2.5)$$

Jednadžba 2.5 ne sadrži temeljno ograničenje smjesa (jednadžba 2.2), koja u ovom slučaju iznosi:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

Uvodeći to ograničenje jednadžba 2.5 postaje:

$$y = a_0(x_1 + x_2 + x_3) + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3$$

Nakon preslagivanja parametara dobivamo:

$$y = (a_0 + a_1)x_1 + (a_0 + a_2)x_2 + (a_0 + a_3)x_3$$

Uvođenjem slijedećih supstitucija:

$$\begin{aligned} b_1 &= (a_0 + a_1) \\ b_2 &= (a_0 + a_2) \\ b_3 &= (a_0 + a_3), \end{aligned}$$

dolazimo do slijedećeg oblika:

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 \quad (2.6)$$

Ovaj model nema slobodnih članova, što je posljedica temeljnog ograničenja smjesa.

2.5.2 Model drugog stupnja

Model drugog stupnja sadrži interakcije i kvadrate faktora. Matematički model za binarnu smjesu:

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 \quad (2.7)$$

Uvođenjem temeljnog ograničenja smjesa i sređivanjem:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 &= 1 - x_2 \\ x_1^2 &= x_1(1 - x_2) \\ x_1^2 &= x_1 - x_1x_2, \end{aligned}$$

te uvođenjem u jednadžbu 2.7 dobivamo:

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 \quad (2.8)$$

Za ternarnu smjesu jednadžba glasi:

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 \quad (2.9)$$

2.5.3 Model trećeg stupnja

Model trećeg stupnja naziva se puni kubni model i glasi:

$$\begin{aligned}
 y = & b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \dots \\
 & + b'_{12}x_1x_2(x_1 - x_2) + b'_{13}x_1x_3(x_1 - x_3) + b'_{23}x_2x_3(x_2 - x_3) + \dots \\
 & + b_{123}x_1x_2x_3
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Češće se koristi pojednostavljeni matematički model koji nazivamo ograničeni kubni model. Jednadžba ograničenog kubnog modela glasi:

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 \tag{2.11}$$

Poglavlje 3

Programski paketi

Planiranje pokusa zahtjeva odgovarajuće programske pakete kako bi se pokusi izvodili što brže i efikasnije. Za modele pokusa sa smjesama koriste se jednostavni algoritmi koji obično ne dozvoljavaju intervenciju i složeniju modifikaciju postojećih modela. U sljedećoj tablici dan je pregled nekih postojećih programskih paketa:

Tablica 3.1: Pregled programskih paketa za planiranje pokusa [5]

Naziv tvrtke	Naziv proizvoda	Pokusi sa smjesama
Advanced Systems and Designs	Anova-TM	Ne
Air Academy Associates	DOE Kiss	Ne
ECHIP Inc.	ECHIP	Ne
Experiment Strategies	Strategy	Da
Launsby Consulting	DOE Wisdom	Ne
Manugistics Inc.	Statgraphics Plus	Da
MINITAB Inc.	Minitab	Da
Nutek	Qualitek-4	Ne
PQ Systems Inc.	DOEpack	Ne
SAS Institute Inc.	JMP	Da
Stat-Ease Inc.	Design-Expert	Da
StatSoft Inc.	Statistica	Da

Ovaj rad analizirati će sljedeće programske pakete:

- Design Expert (inačica 8) [6]
- JMP (inačica 9.0.2) [7]
- Minitab (inačica 16.1) [8]

3.1 Usporedba programskih paketa

Pri provedbi analize pogodnosti programskih paketa koristiti će se probne inačice. Kriteriji će se ocjenjivati numerički, preko ljestvice od 1 do 5, gdje je 1 najlošije a 5 najbolje. Ocjenjivati će se sljedeći kriteriji:

Korisničko sučelje

Preglednost sučelja, dostupnost izbornika, odziv i intuitivnost.

Dokumentacija

O samom programu, funkcijama programa, online aktivnosti (forumi, korisnička podrška).

Funkcionalnost

Opseg funkcija, brzina odziva, pokriva li sve slučajeve.

Fleksibilnost

Mogućnost dodavanja vlastitih funkcija i izmjene definiranih funkcija.

Prikaz rezultata

Preglednost i točnost izlaza, grafički i numerički prikaz.

3.1.1 Korisničko sučelje

Design Expert

Na radnoj plohi nalazi se katalog pokusa koji je vizualno predstavljen mapama. Pri odabiru grupe planove mape se nepotrebno rotiraju. Minimalistički padajući izbornici.

JMP

Čista radna ploha, jasne ikone, niska kompleksnost padajućih izbornika.

Minitab

Radna ploha se dijeli na tri glavna prozora: prozor za izvješća, prozor za unos podataka i prozor za projekte. Padajući izbornici ima mnogo, no dobro su grupirani te to ne čini problem.

3.1.2 Dokumentacija

Design Expert

Online kratke i precizne upute o različitim pokusima, s primjerima.

JMP

Bogata i detaljna dokumentacija o programu i tematici. Sadrži knjige, upute, upute s primjerima, službeni online forum za razmjenu znanja i podataka te korisnička podrška.

Minitab

Bogata i detaljna dokumentacija o programu i tematici. Sadrži opširnu bazu podataka, mnoštvo primjera, korak-po-korak upute, online tečajeve, službeni online forum za razmjenu znanja i podataka i online bazu podataka.

3.1.3 Funkcionalnost**Design Expert**

Katalog pokusa pokriva sve modele.

JMP

Katalog pokusa sadrži simpleks rešetku, simpleks rešetku s centralnom točkom, te mogućnost ograničavanja područja pokusa.

Minitab

Katalog pokusa sadrži simpleks rešetku, simpleks rešetku s centralnom točkom, te mogućnost ograničavanja područja pokusa.

3.1.4 Fleksibilnost**Design Expert**

Slaba.

JMP

Slaba.

Minitab

Ograničena.

3.1.5 Prikaz rezultata**Design Expert**

Numeričko izvješće o prilagodbi, analizi varijance i koeficijentima. Bogato grafičko izvješće uključuje konturni i trodimenzionalni prikaz odziva uz mogućnost mijenjanja prikaza (detaljnost, oznake, rotacija).

JMP

Detaljno numeričko izvješće o prilagodbi, analizi varijance, koeficijentima i predviđanja. Grafičko izvješće sadrži prikaz predviđanja i konturni prikaz smjese.

Minitab

Numeričko izvješće o prilagodbi, rezidualima, analizi varijance i koeficijentima. Grafičko izvješće uključuje konturni prikaz, trodimenzionalni prikaz i skupni prikaz o rezidualima.

3.1.6 Ocjene kriterija

Tablica 3.2: Ocjene kriterija

Kriterij	Design-Expert	Minitab	JMP
Korisničko sučelje	3	4	4
Dokumentacija	3	5	4
Funkcionalnost	5	2	3
Fleksibilnost	1	1	1
Prikaz rezultata	5	4	3
Σ	17	16	15

Programski paket Design-Expert očekivano ima najviše bodova, budući da se radi o programskom paketu specijaliziranom za planiranje i analizu pokusa. Iako ima niže ocjene u području korisničkog sučelja i dokumentacije, to nadoknađuje izvrsnom funkcionalnošću i detaljnim prikazom rezultata (prilog C.1). Programski paketi Minitab i JMP imaju bolje korisničko sučelje i dokumentaciju, no nižu funkcionalnost i prikaz rezultata.

Prije donošenja odluke koji programski paket se smatra najboljim s obzirom na prethodno definirane kriterije, svakim paketom će se izračunati dva primjera i analizirati njihov numerički i grafički izlaz.

3.2 Numerički primjeri

Obraditi će se dva primjera kako bi se mogli usporediti numerički i grafički izlazi programskih paketa. Prvi primjer [10] se bavi istezljivošću užeta koje je ispleteno od polimernih niti. Drugi primjer se bavi vlačnom čvrstoćom nodularnog lijeva [11]. Ulazni podaci dokumentirani su u prilogu B, a izlazni podaci u prilogu C.

3.2.1 Uže od polimera

Pokusom se želi otkriti veza između istezljivosti užeta i polimera od kojih se plete uže. Polimerna smjesa sastoji se od polietilena, polistirena i polipropilena. Proučavati će se točke čiste smjese i točke sa binarnim smjesama, te je odabran plan pokusa $\{3, 2\}$ simpleks rešetke (slika 2.7). Čiste smjese su replicirane dva puta dok su binarne smjese replicirane tri puta, što rezultira sa 15 odzivnih vrijednosti (tablica 3.3). Odziv je mjereno u kilopondima¹. Za matematički model odabran je kvadratni model (jednadžba 2.9). Analiza je provedena u sva tri paketa. Rezultati koeficijenata nalaze se u tablici 3.4.

¹Zastarjela mjerna jedinica *sile* u Tehničkom sustavu jedinica [3]. Definirana kao normirana težina utega od 1 kg, dakle $kp = 9,80665 N$

Tablica 3.3: Točke pokusa i odzivne vrijednosti

Polietilen	Polistiren	Polipropilen	Istezljivost [kp]
0,0	0,0	1,0	16,8, 16,0
0,0	0,5	0,5	10,0, 9,7, 11,8
0,0	1,0	0,0	8,8, 10,0
0,5	0,0	0,5	17,7, 16,4, 16,6
0,5	0,5	0,0	15,0, 14,8, 16,1
1,0	0,0	0,0	11,0, 12,4

Tablica 3.4: Koeficijenti i njihova vrijednost u odgovarajućem paketu

Koeficijent	Design-Expert	Minitab	JMP
b_1	+11,7000	+11,7000	+11,7000
b_2	+9,4000	+9,4000	+9,4000
b_3	+16,4000	+16,4000	+16,4000
b_{12}	+19,0000	+19,0000	+19,0000
b_{13}	+11,4000	+11,4000	+11,4000
b_{23}	-9,6000	-9,6000	-9,6000

Grafički prikaz razlikuje se od paketa do paketa, no svi su vrlo slični. Design-Expert nudi najviše mogućnosti prilagodbe prikaza. Konturni prikazi nalaze se na slikama 3.2a, 3.2b i 3.2c. Trodimenzionalni prikaz (slika 3.3a i 3.3b) moguć je samo u paketima Design-Expert i Minitab.

3.2.2 Vlačna čvrstoća nodularnog lijeva

Ljevaonica Duga Resa d.o.o. bavi se izradom odljevaka od nodularnog lijeva. Proizvodni program ljevaonice uključuje: nadzemne hidrante, podzemne hidrante, prirubnice za vanjske vodovode, dekorativni program i vrtni program.

Potrebno je izraditi plan pokusa kojim bi se dobila optimalna smjesa koja bi zadovoljavala zadane uvijete. Smjesa se sastoji od tri komponente u zadanim udjelima:

- čelik 10% ÷ 80%
- sorel (sirovo sivo željezo) 10% ÷ 60%
- povrat 10% ÷ 50%

Odabrano je ukupno 14 točaka (tablica 3.5) – 6 osnovnih točaka modela, 4 točke za procjenu koliko dobro model pristaje podacima i 4 točke koje se ponavljaju, radi određivanja greške pokusa. Mjereni odziv je granica razvlačenja [N/mm^2] (tablica 3.6). Konturni prikaz nalazi se na slikama 3.4a, 3.4b i 3.4c, dok se trodimenzionalni prikaz nalazi na slikama 3.5a i 3.5b.



Slika 3.1: Dio proizvodnog programa ljevaonice Duga Resa d.o.o. [11]

Tablica 3.5: Točke pokusa i odzivne vrijednosti

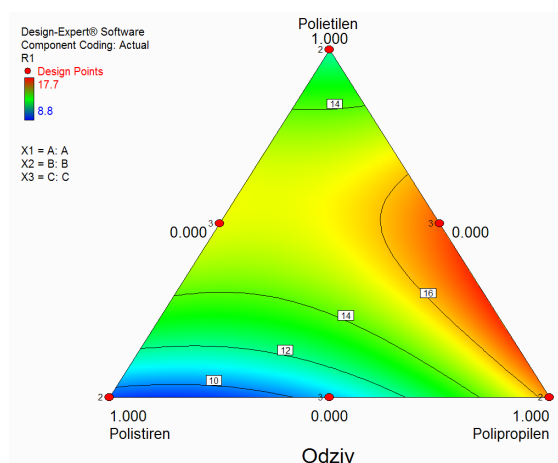
Čelik	Sorel	Povrat	Vlačna čvrstoća [N/mm^2]
0,300	0,600	0,100	313,5, 325,5
0,570	0,230	0,200	351
0,270	0,480	0,250	356
0,100	0,600	0,300	304, 320
0,400	0,100	0,500	356, 382
0,800	0,100	0,100	288,5, 331,5
0,100	0,400	0,500	412
0,445	0,355	0,200	376
0,600	0,100	0,300	362
0,295	0,305	0,400	389

Tablica 3.6: Koeficijenti i njihova vrijednost u odgovarajućem paketu

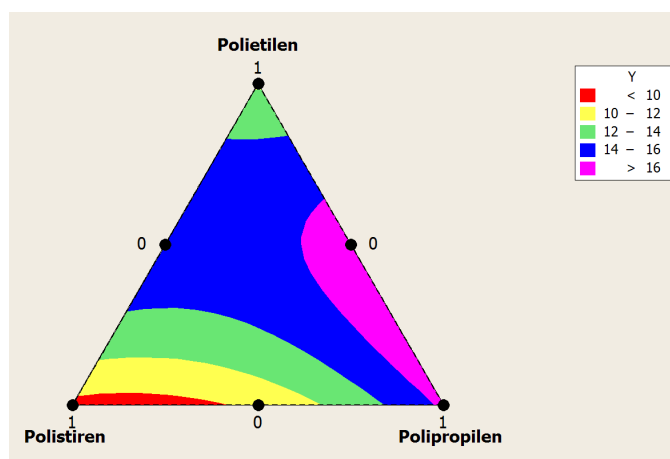
Koeficijent	Design-Expert	Minitab	JMP
b_1	+248,84889	+248,8	+248,8488
b_2	+23,10962	+23,1	+23,10962
b_3	+481,22540	+481,2	+481,2254
b_{12}	+853,67927	+853,7	+853,6792
b_{13}	-126,85544	-126,9	-126,8554
b_{23}	+482,04302	+482,0	+482,0430

3.3 Zaključak usporedbe

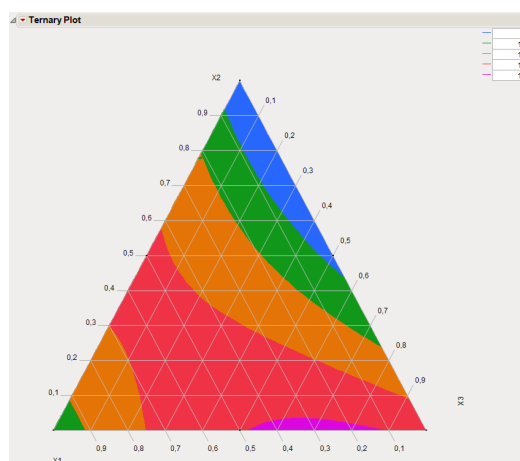
Numerički rezultati gotovo su identični za sva tri programska paketa u oba primjera. Razlika je u broju korištenih decimalnih mjesta, gdje Design-Expert prikazuje pet decimala dok Minitab prikazuje samo jednu. Razlog tome je što je regresijska funkcija čvrsto defi-



(a) Design-Expert: Konturni prikaz odziva



(b) Minitab: Konturni prikaz odziva

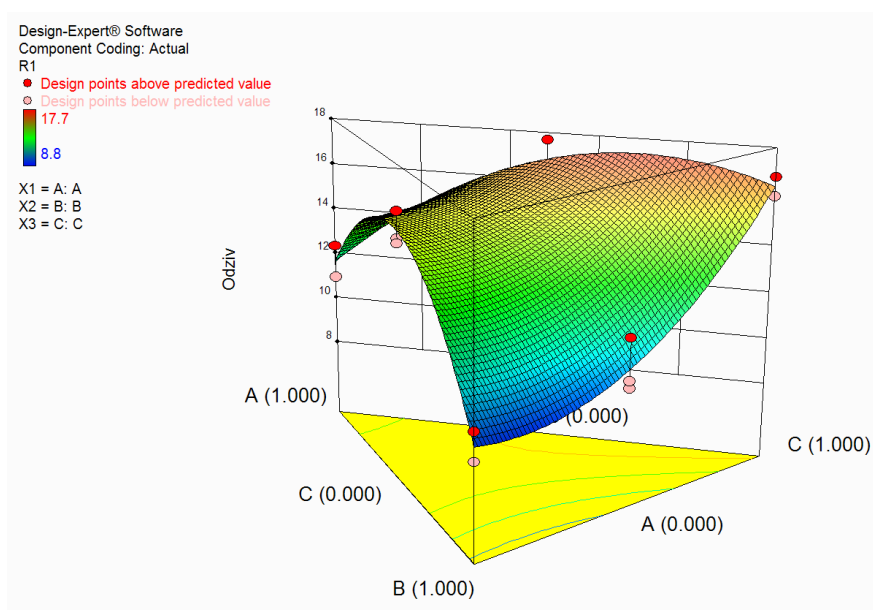


(c) JMP: Konturni prikaz odziva

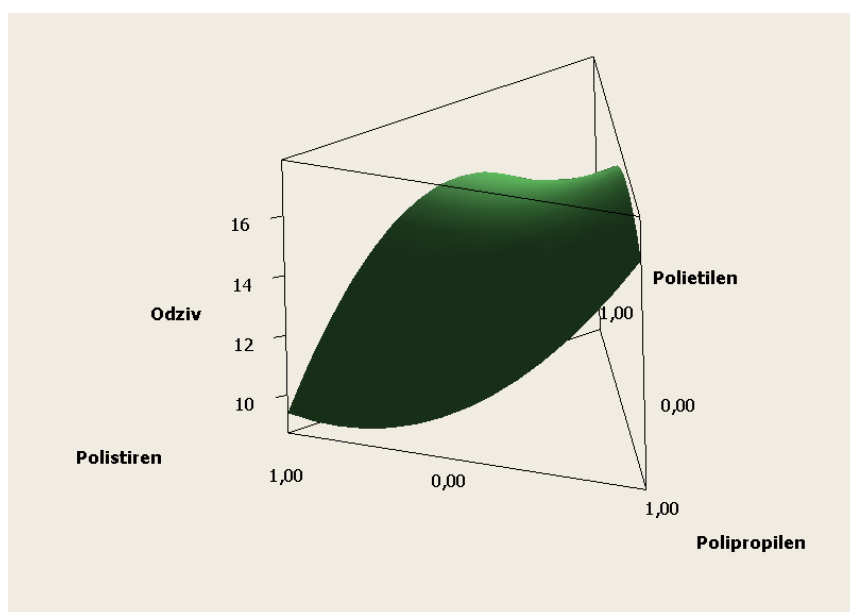
Slika 3.2: Primjer 1., konturni prikaz odziva, odziv u kp

nirana u literaturi [12], te vrlo vjerojatno sva tri programski paketa koriste istu funkciju, uz minimalne razlike u konvergenciji.

Grafički prikaz odziva prikazuje se pomoću dvodimenzionalnog konturnog prikaza



(a) Design-Expert: trodimenzionalni prikaz odziva

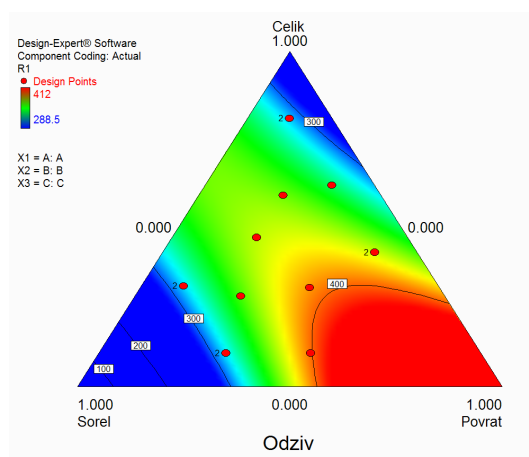


(b) Minitab: trodimenzionalni prikaz odziva

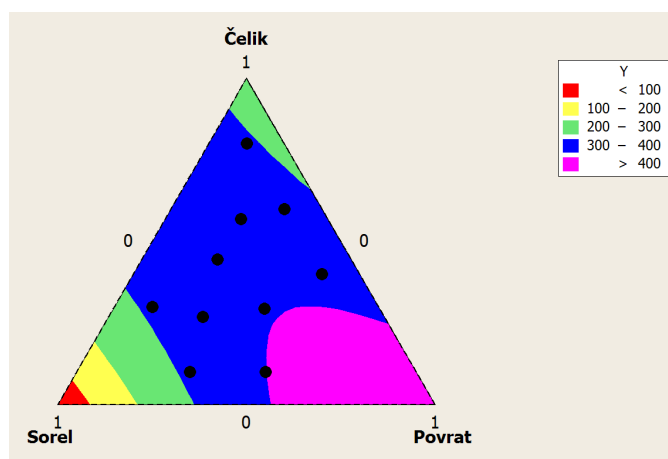
Slika 3.3: Primjer 1., trodimenzionalni prikaz odziva, odziv u kp

(slike 3.2 i 3.4) i trodimenzionalnog prikaza (slike 3.3 i 3.5). Design-Expert oblikuje detaljne i pregledne odzive (slike 3.2a, 3.3a, 3.4a i 3.5a), koje se lako izmjenjuju (nazivi točaka, dodavanje konturnih linija). Minitab oblikuje jednostavne konturne prikaze (slike 3.2b i 3.4b) s ograničenim mogućnostima izmjene (određivanje spektra boja), i jednostavne trodimenzionalne prikaze (slike 3.3b i 3.5b). JMP oblikuje samo dvodimenzionalne konturne prikaze (slike 3.2c i 3.4c) sa ograničenim mogućnostima izmjene.

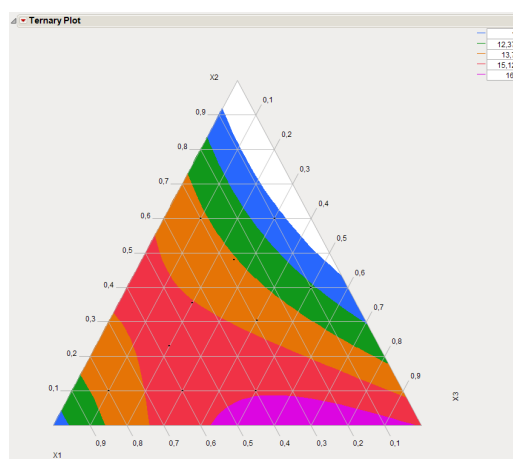
Na temelju postavljenih kriterija i rezultata primjera jasno je da je Design-Expert najbolji odabir. Iako su Desing-Expert i JMP programski paketi specijalizirani za plani-



(a) Design-Expert: Konturni prikaz odziva



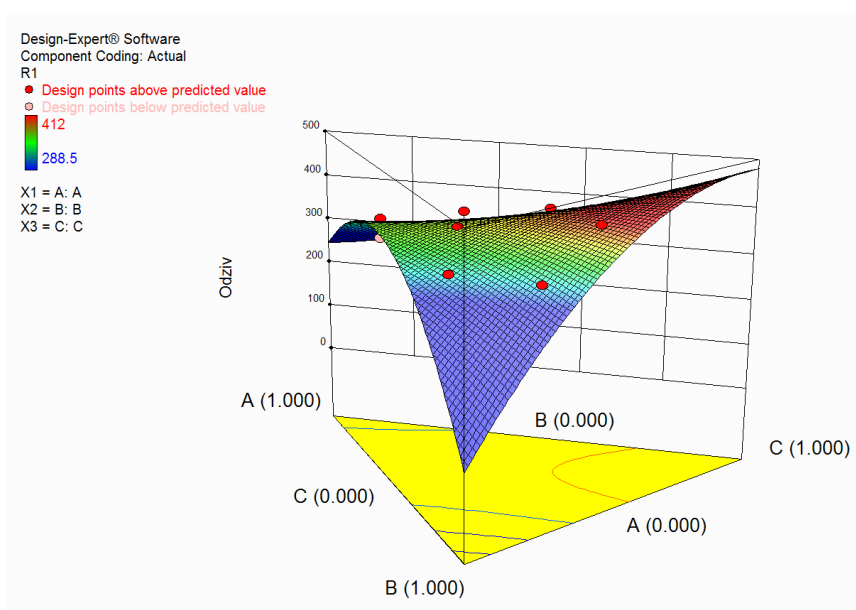
(b) Minitab: Konturni prikaz odziva



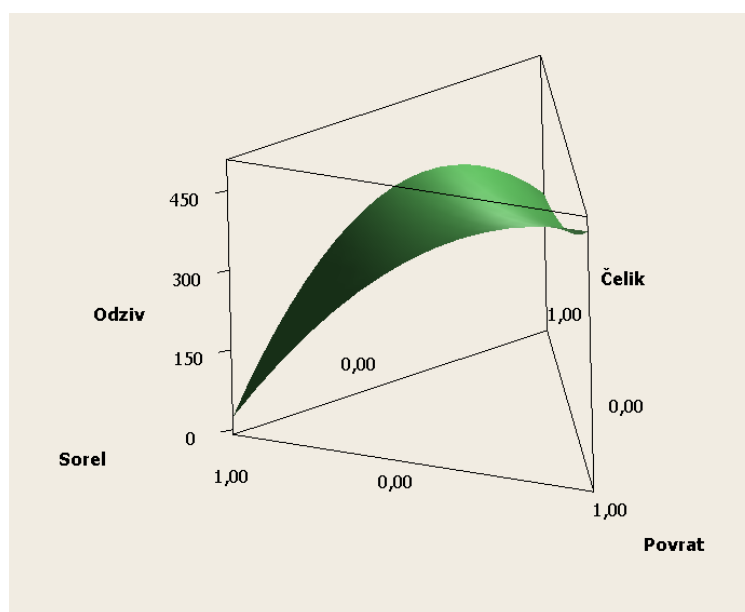
(c) JMP: Konturni prikaz odziva

Slika 3.4: Primjer 2., konturni prikaz odziva, odziv u N/mm^2

ranje i izvođenje pokusa, Design-Expert ima bogatiju ponudu pokusa i lakše upravljanje grafičkim izlazima. JMP ima bogatiju dokumentaciju i jaku pozadinu (SAS), no u ovom slučaju težište je na funkcionalnosti i primjeni a ne popratnom sadržaju. Minitab je pro-



(a) Design-Expert: trodimenzionalni prikaz odziva



(b) Minitab: trodimenzionalni prikaz odziva

Slika 3.5: Primjer 2., trodimenzionalni prikaz odziva, odziv u N/mm^2

gramski paket za statistiku te je dobar izbor ukoliko su sve potrebe planiranja i izvođenja pokusa zadovoljene jednostavnim planovima.

Niti jedan paket nije zadovoljio kriterij fleksibilnosti. Moguće je definirati granična područja, no nije moguća ikakva drugačija intervencija pri samom oblikovanju modela. Takva fleksibilnost nije potrebna u industriji gdje se uglavnom koriste gotovi planovi pokusa, no potrebna je u znanstveno-istraživačkom radu.

Poglavlje 4

Algoritam

Razlozi razvijanja vlastitoga algoritma umjesto korištenja razvijenih programskih paketa su težnja većoj fleksibilnosti, uštedi financijskih resursa, mogućnosti optimiranja na fundamentalnoj razini te mogućnosti nadogradnje.

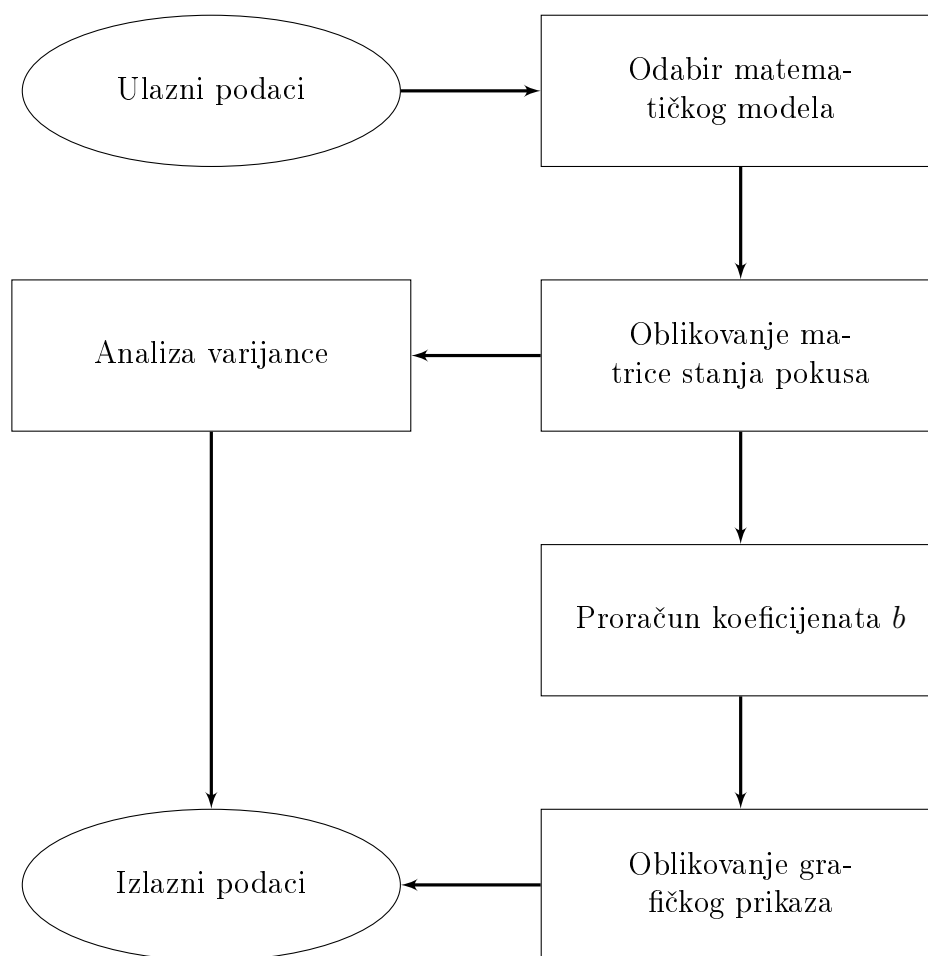
Algoritam je razvijen u MATLAB okruženju budući da isti sadrži mnoštvo predefiniranih funkcija koje olakšavaju programiranje i omogućavaju fokus na razvoj samog algoritma. Primarna je funkcionalnost, tj. točan proračun koeficijenata i analiza varijance, te odgovarajući dvodimenzionalni i trodimenzionalni grafički prikaz.

4.1 Razvoj algoritma

Algoritam je podijeljen na sedam blokova (slika 4.1), koji se provode u nizu:

1. Ulazni podaci
2. Odabir matematičkog modela
3. Formiranje matrice stanja pokusa
4. Analiza varijance
5. Proračun koeficijenata b
6. Oblikovanje grafičkog prikaza
7. Izlazni podaci

Blokovi su različite kompleksnosti, te će biti prikazani u ovom radu.



Slika 4.1: Blok struktura algoritma

4.1.1 Ulazni podaci

Ulazni podaci sastoje se od matrice stanja pokusa i matrice odzivnih vrijednosti. Matrice je potrebno smjestiti u istu mapu gdje se nalazi i `algoritam.m`, te ih preimenovati u `MATRICA_OBLIKA.txt` i `ODZIV.txt`. Pri oblikovanju matrica potrebno je uzeti u obzir da MATLAB radi sa decimalnom točkom, a decimalnim zarezom odvajaju se stupci (tablica 4.1).

4.1.2 Odabir matematičkog modela

Razvijen je algoritam niže matematičke kompleksnosti u kojem se koristi kvadratni model (jednadžba 2.9).

Tablica 4.1: Prikaz ulaznih datoteka

Matrica oblika	Matrica odziva
0.5, 0.5, 0.0	15
0.0, 1.0, 0.0	8.8
0.0, 0.5, 0.5	9.7
0.0, 1.0, 0.0	10
0.5, 0.0, 0.5	17.7
1.0, 0.0, 0.0	11
0.5, 0.0, 0.5	16.4
0.0, 0.5, 0.5	10
1.0, 0.0, 0.0	12.4
0.0, 0.0, 1.0	16.8
0.5, 0.5, 0.0	14.8
0.0, 0.0, 1.0	16
0.0, 0.5, 0.5	11.8
0.5, 0.0, 0.5	16.6
0.5, 0.5, 0.0	16.1

4.1.3 Formiranje matrice stanja pokusa

Nakon učitavanja ulaznih podataka algoritam oblikuje matricu (\mathbf{X}) sljedećeg oblika:

$$\text{Matrica stanja pokusa} = \begin{bmatrix} x_{1_1} & x_{2_1} & x_{3_1} & x_{1_1}x_{2_1} & x_{1_1}x_{3_1} & x_{2_1}x_{3_1} \\ x_{1_2} & x_{2_2} & x_{3_2} & x_{1_2}x_{2_2} & x_{1_2}x_{3_2} & x_{2_2}x_{3_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{1_n} & x_{2_n} & x_{3_n} & x_{1_n}x_{2_n} & x_{1_n}x_{3_n} & x_{2_n}x_{3_n} \end{bmatrix}$$

4.1.4 Analiza varijance

Analiza varijance najčešće se upotrebljava kada se želi testirati značajnost utjecajnoga faktora kroz izlazne varijable. Cilj je ispitati odnos varijacija poznatih faktora s varijacijama ostataka (reziduala). Ako je taj odnos, tzv. empirijski F-omjer, statistički značajan zaključujemo da su varijance iz prethodnog omjera značajno razlikuju. Za proračun koristiti će se jednadžbe iz literature [12]:

$$S_{yy} = SS_R + SS_E \quad (4.1)$$

$$SS_E = \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (4.2)$$

$$SS_R = \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n} \quad (4.3)$$

Za potrebe algoritma jednadžbe 4.2 i 4.3 prilagođavaju se ulaznim podacima te po-primaju slijedeći oblik:

$$SS_E = \mathbf{y}\mathbf{y}' - \mathbf{b}\mathbf{X}'\mathbf{y}' \quad (4.4)$$

$$SS_R = \mathbf{b}\mathbf{X}'\mathbf{y}' - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n} \quad (4.5)$$

4.1.5 Proračun koeficijenata b

Proračun se vrši metodom najmanjih kvadrata pomoću MATLAB-ove ugrađene funkcije *lsqcurvefit*.

4.1.6 Oblikovanje grafičkog prikaza

Oblikuju se tri dvodimenzionalna prikaza i dva trodimenzionalna prikaza:

- dvodimenzionalni prikaz točaka pokusa
- dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom
- trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom
- dvodimenzionalni konturni prikaz odziva
- trodimenzionalni prikaz odziva

Za oblikovanje dvodimenzionalnog prikaza točaka pokusa (slika 4.3) koriste se algoritmi razvijeni u *Biosystems Data Analysis Group* [13]. Prije oblikovanja prikaza potrebno je oblikovati odgovarajuće matrice te odrediti korak. Oblikovanje matrica prikazano je na slici 4.2. Za prikaz tih matrica koristimo MATLAB-ove ugrađene funkcije *plot*, *plot3*, *contourf* i *surf*. Korak određuje korisnik. Preporučuje se korak 100 ili 200, iznad tih vrijednosti dolazi da znatnog produženja izvođenja algoritma.

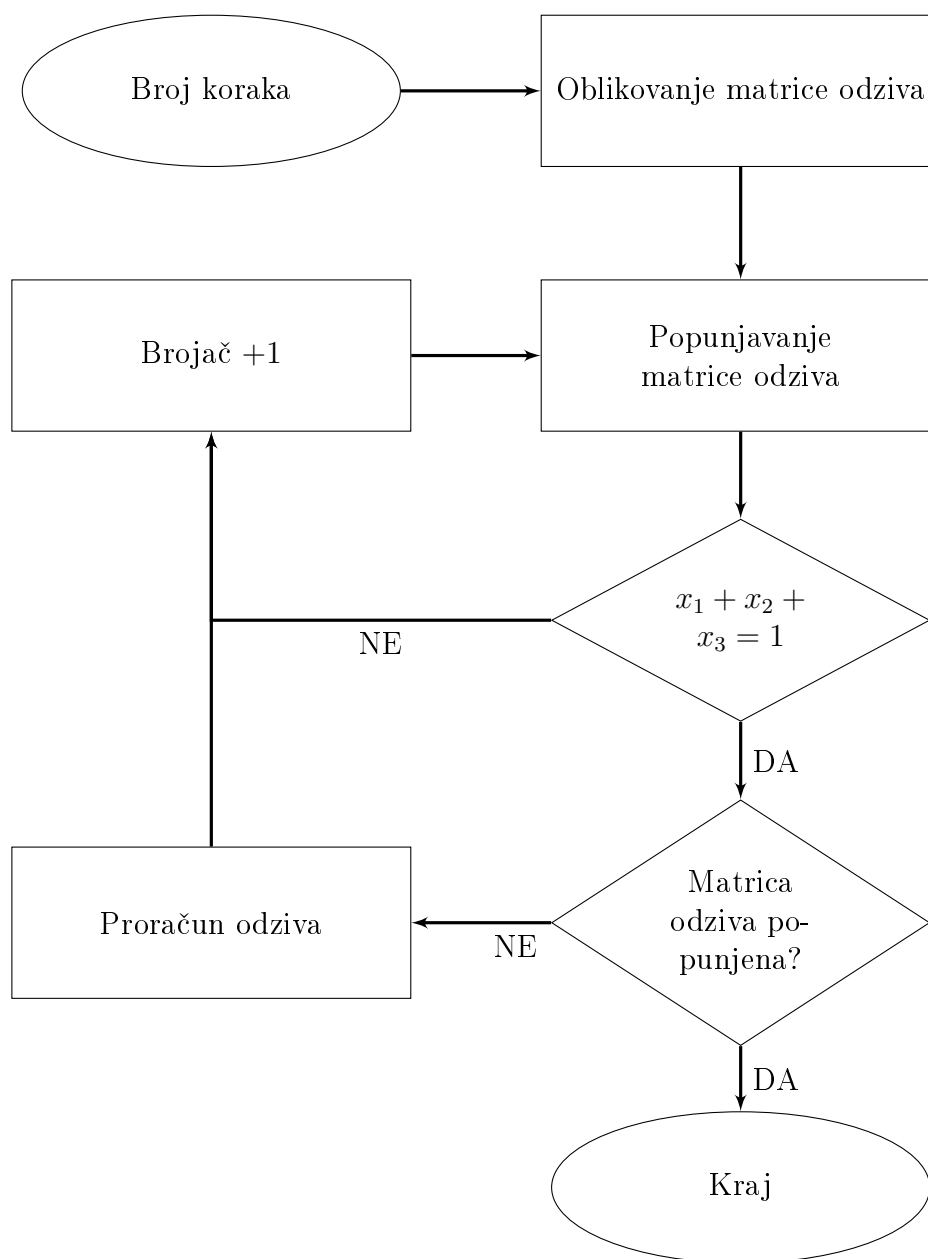
Dvodimenzionalni i trodimenzionalni točkasti prikaz (slike 4.4, 4.6, 4.5 i 4.7) koristi se za pregled točaka i vizualnu kontrolu točaka odziva. Točkasti prikaz ne sadrži vršne točke. Dvodimenzionalni konturni prikaz odziva (slike 4.8 i 4.9) i trodimenzionalni prikaz odziva (slike 4.10 i 4.11) koriste se za vizualno očitavanje odziva i daljnju analizu korisnika.

Svi prikazi nalaze se u x, y koordinatnom sustavu. Svaka prikazana točka odgovara određenoj točki smjese, te se može izračunati slijedećim jednadžbama:

$$x_1 = \frac{2}{\sqrt{3}}y \quad (4.6)$$

$$x_2 = 1 - x - \frac{\sqrt{3}}{3}y \quad (4.7)$$

$$x_3 = x - \frac{1}{\sqrt{3}}y \quad (4.8)$$



Slika 4.2: Prikaz oblikovanja matrice odziva

4.1.7 Izlazni podaci

Algoritam oblikuje i prikazuje slijedeće podatke:

- matricu stanja pokusa (**X**)
- matricu koeficijenata **b**
- analizu varijance
- dvodimenzionalni prikaz točaka pokusa
- dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom

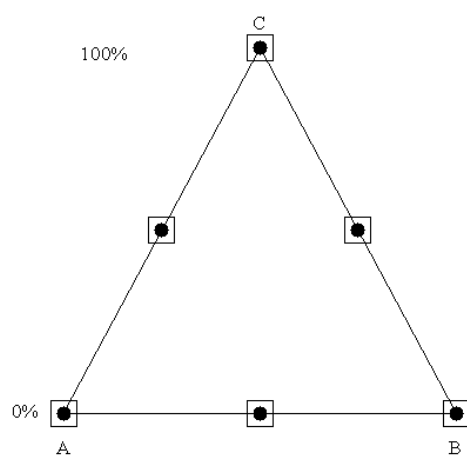
- trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom
- dvodimenzionalni konturni prikaz odziva
- trodimenzionalni prikaz odziva

4.2 Primjena algoritma

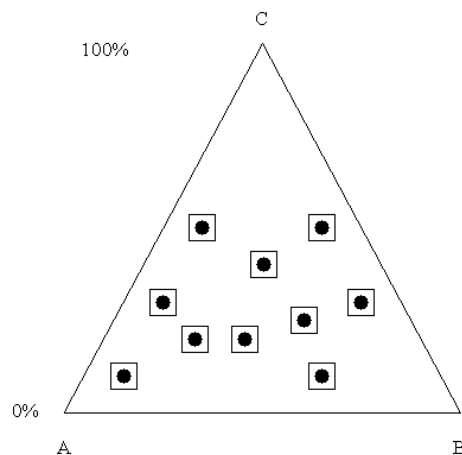
Korištenjem razvijenoga algoritma riješiti će se dva primjera iz točke 3.2. Izračunate vrijednosti koeficijenata nalaze se u tablici 4.2.

Tablica 4.2: Koeficijenti izračunati pomoću algoritma

Koeficijent	Primjer 1.	Primjer 2.
b_1	+11,7000	+248,8489
b_2	+9,4000	+23,1096
b_3	+16,4000	+481,2254
b_{12}	+19,0000	+853,6792
b_{13}	+11,4000	-126,8554
b_{23}	-9,6000	+482,0430

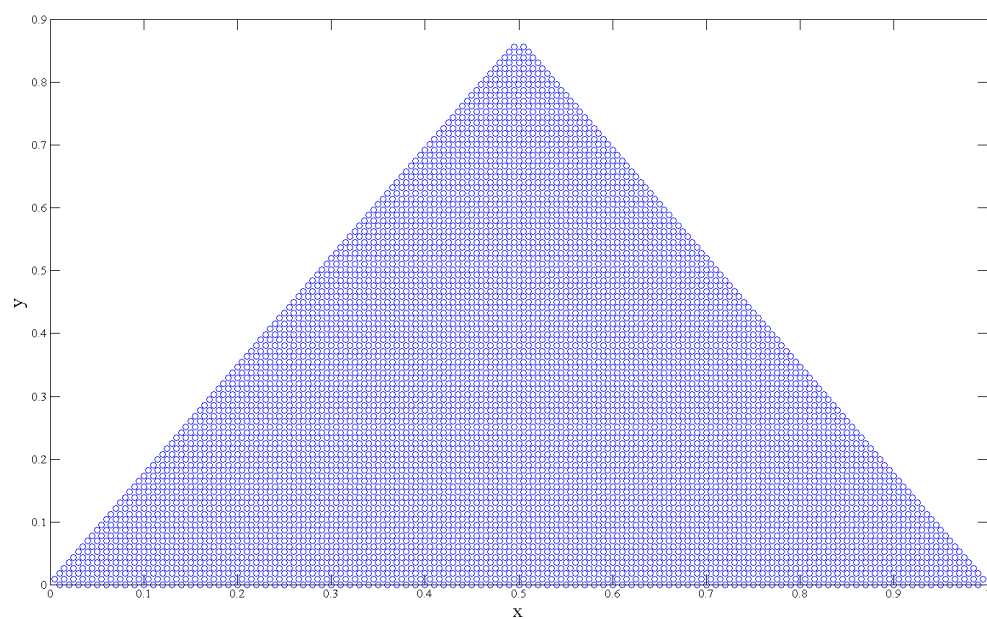


(a) Primjer 1.

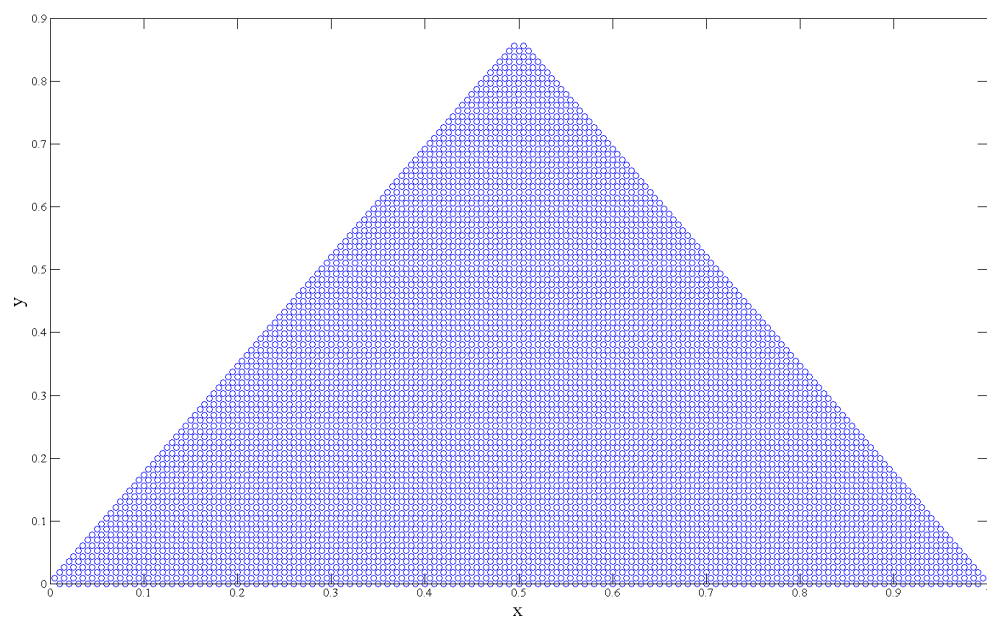


(b) Primjer 2.

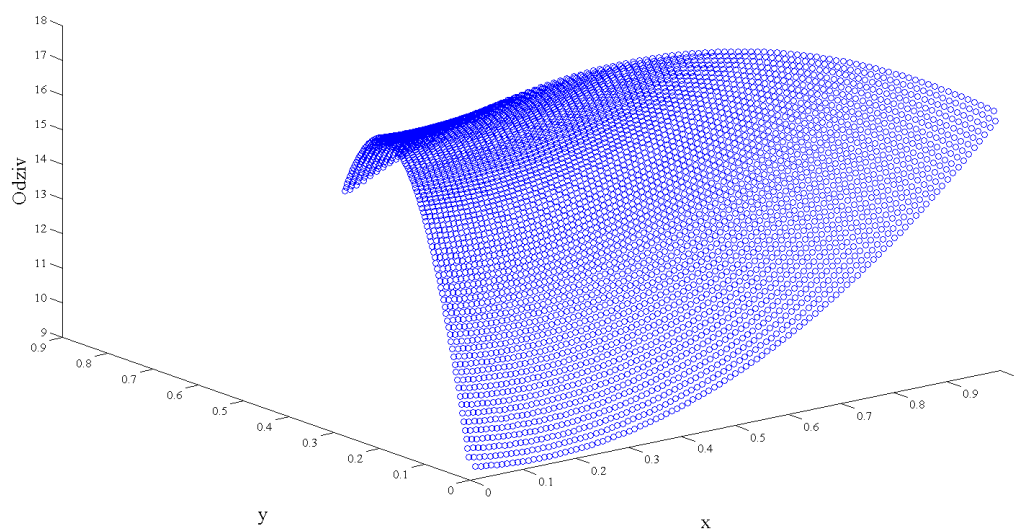
Slika 4.3: Dvodimenzionalni prikaz točaka pokusa



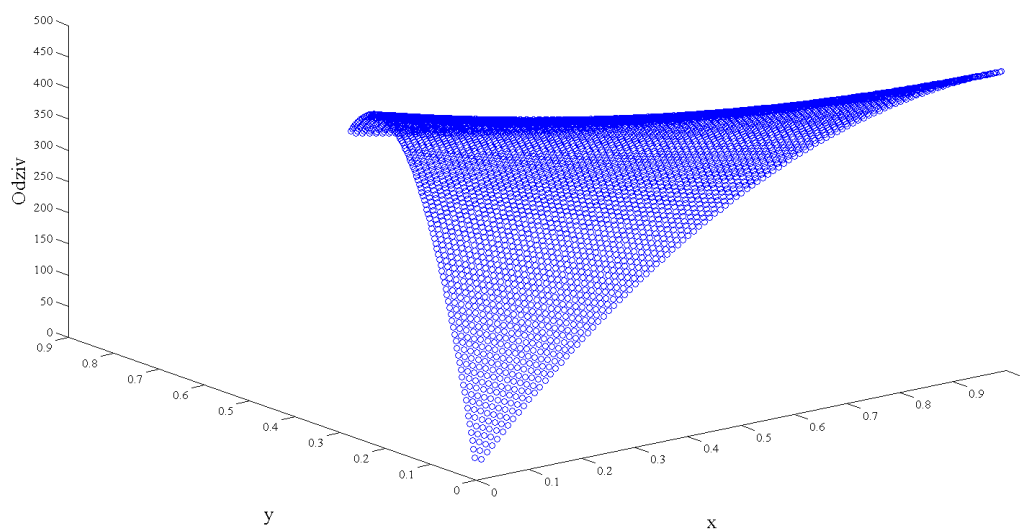
Slika 4.4: Dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom, primjer 1.



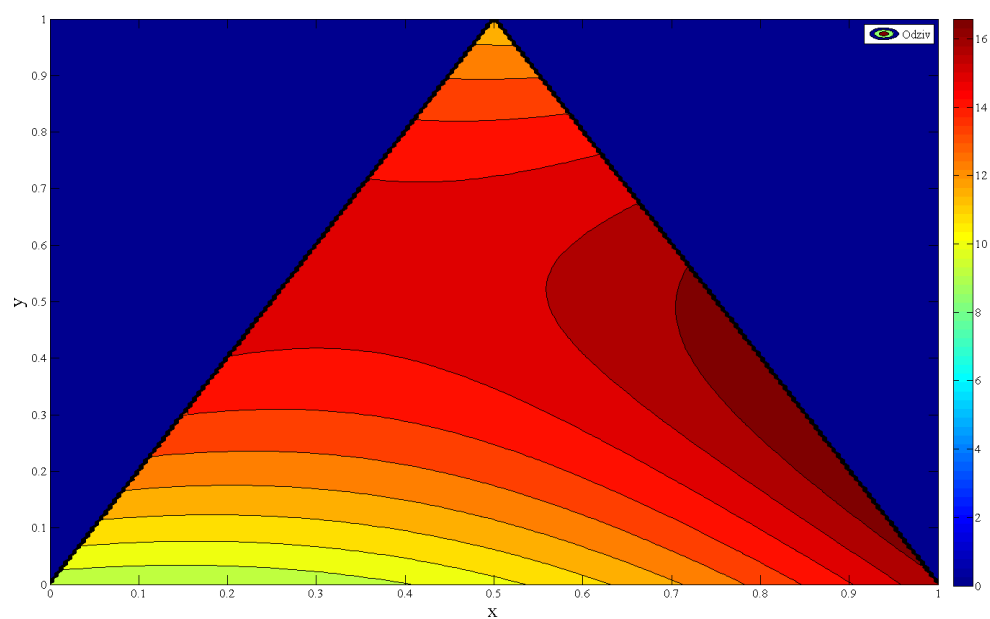
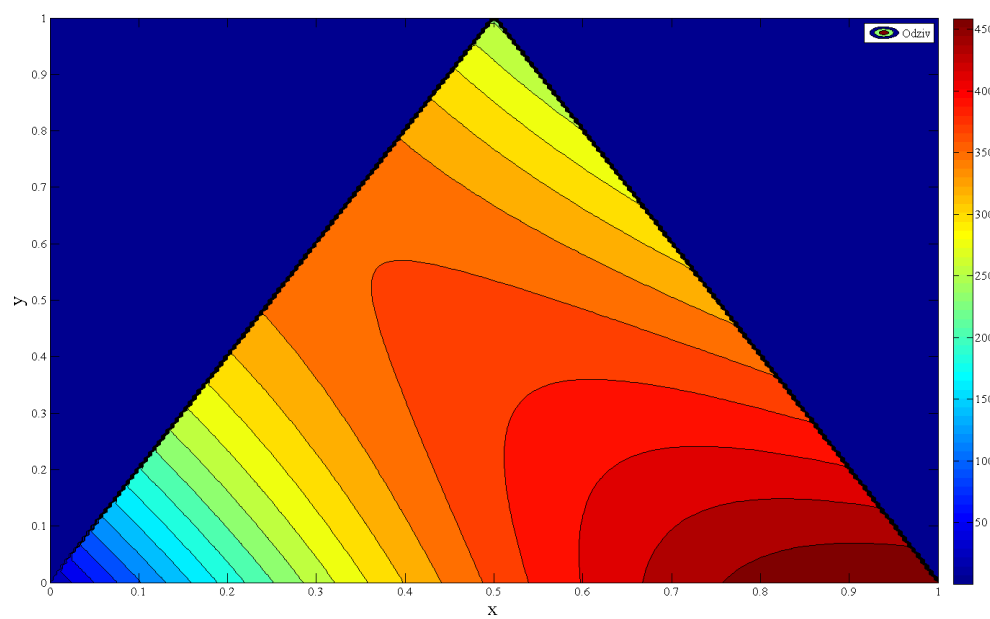
Slika 4.5: Dvodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom, primjer 2.

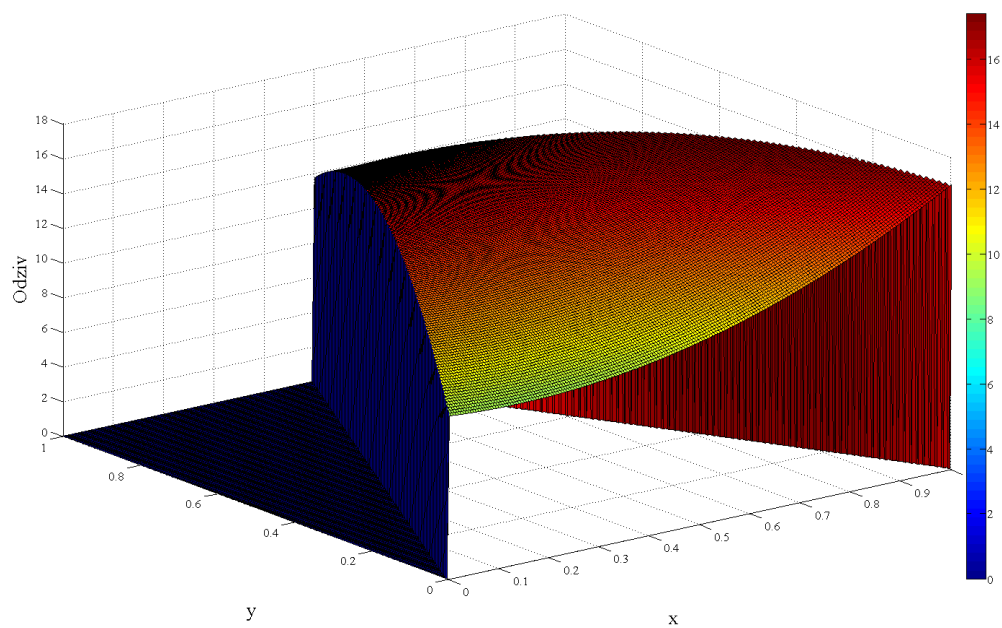


Slika 4.6: Trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom, primjer 1.

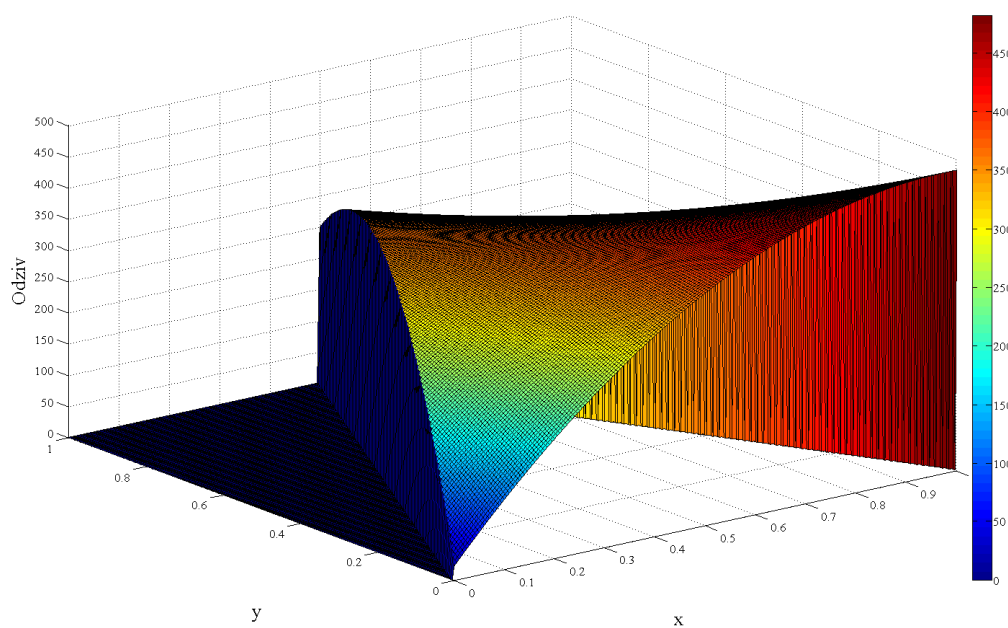


Slika 4.7: Trodimenzionalni točkasti prikaz točaka izračunatih regresijskom funkcijom, primjer 2.

Slika 4.8: Dvodimenzionalni konturni prikaz odziva, primjer 1., odziv u kp Slika 4.9: Dvodimenzionalni konturni prikaz odziva, primjer 2., odziv u N/mm^2



Slika 4.10: Trodimenzionalni prikaz odziva, primjer 1., odziv u kp



Slika 4.11: Trodimenzionalni prikaz odziva, primjer 2., odziv u N/mm^2

Poglavlje 5

Zaključak

Razvijen je i razrađen algoritam koji samostalno funkcionira unutar MATLAB okruženja, zadovoljavajuće robusnosti i odgovarajućeg stupnja poopćenosti. U trenutnom stanju algoritam se može primjenjivati na problemima niže kompleksnosti uz zadovoljavajuće rezultate. Otvoren kod omogućava intervencije korisnika u gotovo¹ bilo kojem segmentu.

Algoritam je prvenstveno namijenjen primjeni u znanstveno istraživačkim radovima. Primjena u takvom okruženju potencira evoluciju algoritma, pošto bi svaki rad obogatio algoritam, što bi rezultiralo efikasnim alatom kako za industrijske potrebe tako za znanstveno istraživačke potrebe.

Na temelju usporedbe numeričkih rezultata, tj. izračuna koeficijenata (tablice 3.4, 3.6 i 4.2) može se zaključiti kako algoritam proračunava koeficijente zadovoljavajućom preciznošću i točnošću. Programski paket Design-Expert zaokružuje vrijednosti na pet decimala, a vrijednosti izračunate algoritmom prikazane u radu zaokružene su na četiri decimale. Broj zaokruživanja decimala korisnik može odrediti unutar MATLAB-a pomoću naredbi *format short* i *format long*.

Dvodimenzionalni konturni prikazi oblikovani algoritmom veoma su slični prikazima oblikovani programskim paketom Design-Expert (slike 3.2a, 3.4a, 4.8 i 4.9), uz razliku što prikaz oblikovan algoritmom ima više kontura. Korisnik može izmijeniti broj kontura pomoću naredbe *contourf*.

Trodimenzionalni prikazi odziva oblikovani algoritmom slični su prikazima oblikovani programskim paketom Design-Expert (slike 3.3a, 3.5a, 4.10 i 4.11) uz razliku što prikaz oblikovan algoritmom nije omeđen prizmom i što su mu bridovi obojani. U trenutnom stanju prikaz oblikovan s algoritmom je lošiji od prikaza oblikovanog programskim paketom Design-Expert. Za daljnja unaprjeđenja oblikovanja trodimenzionalni prikaza odziva kao uzor trebao bi se uzeti prikaz programskog paketa Design-Expert.

¹Budući da se algoritam nalazi u MATLAB okruženju, vrijede standardna ograničenja samog programskog paketa MATLAB

Zadatak ovog završnog rada bio je oblikovati algoritam koji će rješavati probleme niže kompleksnosti, što je uspješno i učinjeno. Razvijen je robustan algoritam koji se može dalje nadograđivati u više različitih pravaca:

- grafičkog sučelja u svrhu lakšeg korištenja,
- dodavanje matematičkih modela više kompleksnosti,
- povećanje komponenti smjesa,
- prebacivanje iz MATLAB okruženja u C++ u svrhu povećanja brzine proračuna i povećane autonomije,
- uređivanje prikaza redefiniranjem paleta i prikaza osi,
- dodavanje mogućnosti poput optimiranja,
- dogradnja dodatnih kriterija analizi ali i oblikovanju samih modela pokusa sa smjesama. [14]

Literatura

- [1] <https://enciklopedija.carnet.hr>
- [2] Montgomery, D.C., *Design and Analysis of Experiments, Fifth Edition*, John Wiley & Sons, New York, NY, 2001
- [3] Grupa autora, *Tehnički Leksikon*, Leksikografski zavod Miroslav Krleža, Zagreb, ZG, 2007
- [4] Goupy, J., Lee, C., *Introduction to Design of Experiments with JMP Examples, Third Edition*, NC: SAS Institute Inc., 2007
- [5] www.qualitydigest.com/nov98/html/doe.html
- [6] www.statease.com/dx8descr.html
- [7] www.jmp.com
- [8] www.minitab.com
- [9] Scheffé H., *A 'Mixed Model' for Analysis of Variance.*, Annals of Mathematical Statistics, Vol 27., str. 22–36, 1956
- [10] Cornell, J. A., *Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data*, John Wiley & Sons, New York, NY, 1990
- [11] Babić, A., *Optimiranje smjesa primjenom planiranja pokusa*, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2010
- [12] Myers, Raymond H., Montgomery, Douglas C., *Response Surface Methodology, Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, New York, NY, 1995
- [13] www.bdagroup.nl
- [14] Cajner, H., *Višekriterijsko adaptivno oblikovanje planova pokusa*, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2011

Prilozi

Prilog A MATLAB programski kod algoritma

Prilog B Ulazni podaci za programske pakete

Prilog C Izlazni podaci za programske pakete

Prilog A

MATLAB programski kod algoritma

```
% *****
%           Algoritam za planiranje i analizu pokusa sa smjesama
% *****
%   Bruno Pešec, veljača, 2012.
% *****

clc
clear all

% *****
%           1. Ulazni podaci
% *****

% Učitavanje matrice oblika:
D=load('MATRICA_OBLIKA.txt');

% Učitavanje rezultata mjerenja:
Y=(load('ODZIV.txt'))';

% *****
%           3. Formiranje matrice stanja pokusa
% *****

X=zeros(length(D(:,1)),6);
for cnt_i=1:length(D(:,1))
X(cnt_i,:)= [D(cnt_i,1), D(cnt_i,2), D(cnt_i,3),...
              (D(cnt_i,1)) *(D(cnt_i,2)), (D(cnt_i,1)) *(D(cnt_i,3)),...
              (D(cnt_i,2)) *(D(cnt_i,3))];
end
```

```

% *****
%      5. Proračun koeficijenta b metodom najmanjih kvadrata
% *****

% Formiranje Xdata parova tocaka za LSQcurve:
    Xdata=[X(:,1) X(:,2) X(:,3)]';
    disp('Matrica X;Y')

% Početna vrijednost vektora koeficijenata
    x0=[mean(Y),mean(Y),mean(Y),mean(Y),mean(Y),mean(Y)];

% Definiranje regresijske funkcije:
    response = inline('x(1).*Xdata(1,:) + x(2).*Xdata(2,:) +
                      x(3).*Xdata(3,)+ x(4).*Xdata(1,).*Xdata(2,)+
                      x(5).*Xdata(1,).*Xdata(3,)+
                      x(6).*Xdata(2,).*Xdata(3,)', 'x', 'Xdata');

% Optimiranje parametara funkcije regresije:
    [x, resnorm, residuals] = lsqcurvefit(response,x0, Xdata, Y);

% *****
%      4. Analiza varijance
% *****

SS_R=(x*X'*Y')-((sum(Y))^2/size(Y,2));
SS_E=(Y*Y')-(x*X'*Y');
S_yy=SS_R+SS_E;

% *****
%      6. Oblikovanje grafičkog prikaza
% *****

brojKoraka = 100;
korak=1/brojKoraka;

%   Udio smjese A: x_A
    x_A=(0:korak:1);
%   Udio smjese B: x_B
    x_B=(0:korak:1);
%   Udio smjese C: x_C
    x_C=(0:korak:1);

M_odziv_n = 2 * brojKoraka - 1;
M_odziv = zeros( M_odziv_n+2, M_odziv_n+2);

```

```

S_X=[];
S_Y=[];
S_Z=[];
for i=1:brojKoraka
    xA=x_A(i);
    for j=1:brojKoraka
        xB=x_B(j);
        for k=1:brojKoraka
            xC=x_C(k);

            if ((xA + xB + xC)<1.0001) &&( (xA + xB + xC)>0.9999)
                SS_Z=x(1)*(xA) + x(2)*(xB) + x(3)*(xC)+
                    x(4)*(xA)*(xB)+x(5)*(xA)*(xC)+ x(6)*(xB)*(xC);
                S_Z=[S_Z SS_Z];
                SS_X=(1-xC-xB)/2+xC;
                SS_Y=sqrt(((xA)^2)-((1-xC-xB)/2)^2);
                S_X=[S_X SS_X];
                S_Y=[S_Y SS_Y];

                % Indeksi u matrici iz koordinata točaka:
                i_M= round( 2* (SS_X/korak) +1);
                j_M= round( 2* (SS_Y)/(korak*0.866025)+1);

                M_odziv(j_M, i_M) = SS_Z;
            end
        end
    end
end
toc

% Definiranje točaka čiste smjese:

% *----
%  - -
%   -
%   M_odziv(1,1)=x(2);

% ----*
%  - -
%   -
%   M_odziv(1,M_odziv_n+2)=x(3);

% ----
%  - -
%   *
%   M_odziv(M_odziv_n+2, round(M_odziv_n/2) +1)=x(1);

```

```

for i = 1 : (M_odziv_n+2)
    for j= 2: (M_odziv_n+1)
        if ((M_odziv(i,j-1)~=0) && (M_odziv(i,j+1)~=0) && M_odziv(i,j)==0)
            M_odziv(i,j)=(M_odziv(i,j-1)+M_odziv(i,j+1))/2;
        end
    end
end

for i = 2 : (M_odziv_n+1)
    for j= 1: (M_odziv_n+2)
        if ((M_odziv(i-1,j)~=0) && (M_odziv(i+1,j)~=0) && M_odziv(i,j)==0)
            M_odziv(i,j)=(M_odziv(i+1,j)+M_odziv(i-1,j))/2;
        end
    end
end

% *****
%       7. Izlazni podaci
% *****

% Numerički prikazi:

disp('Matrica X plana pokusa:')
X

disp('Matrica koeficijenata b:')
disp(x)

disp('Analiza varijance:')
SS_R
SS_E
S_yy

% Grafički prikazi:

% Oznake na vrhovima trokuta:
    labels = char('A','B','C');

% Generiranje plota (prvi za točke, drugi za okvire):
    figure(1),plotmixtdes((D.*100),labels,'k.',30);
        hold on
        plotmixtdes((D.*100),labels,'ks',20);
        hold off

```

```
figure(2),plot(S_X,S_Y,'o'), xlabel('x'),ylabel('y')
figure(3),plot3(S_X,S_Y,S_Z,'o'), xlabel('x'),ylabel('y'),zlabel('Odziv')

X_odziv=0:(1/(size(M_odziv,1)-1)):1;
Y_odziv=0:(1/(size(M_odziv,1)-1)):1;

figure(4),contourf(X_odziv,Y_odziv,M_odziv,20), xlabel('x'),ylabel('y'),
                                         legend('Odziv')
figure(5),surf(X_odziv,Y_odziv,M_odziv), xlabel('x'),ylabel('y'),
                                         zlabel('Odziv')
```

Prilog B

Ulazni podaci za programske pakete

B.1 Design-Expert

Select	Std	Run	Component 1 A:A	Component 2 B:B	Component 3 C:C	Response 1 R1
	3	1	0.500	0.500	0.000	15
	13	2	0.000	1.000	0.000	8.8
	6	3	0.000	0.500	0.500	9.7
	9	4	0.000	1.000	0.000	10
	12	5	0.500	0.000	0.500	17.7
	10	6	1.000	0.000	0.000	11
	7	7	0.500	0.000	0.500	16.4
	8	8	0.000	0.500	0.500	10
	5	9	1.000	0.000	0.000	12.4
	15	10	0.000	0.000	1.000	16.8
	11	11	0.500	0.500	0.000	14.8
	2	12	0.000	0.000	1.000	16
	14	13	0.000	0.500	0.500	11.8
	1	14	0.500	0.000	0.500	16.6
	4	15	0.500	0.500	0.000	16.1

(a) Primjer 1.

Select	Std	Run	Component 1 A:A	Component 2 B:B	Component 3 C:C	Response 1 R1
	3	1	0.300	0.600	0.100	313.5
	12	2	0.570	0.230	0.200	351
	5	3	0.270	0.480	0.250	356
	8	4	0.100	0.600	0.300	304
	11	5	0.400	0.100	0.500	356
	9	6	0.800	0.100	0.100	288.5
	6	7	0.800	0.100	0.100	331.5
	7	8	0.400	0.100	0.500	382
	4	9	0.100	0.400	0.500	412
	14	10	0.300	0.600	0.100	325.5
	10	11	0.445	0.355	0.200	376
	2	12	0.600	0.100	0.300	362
	13	13	0.295	0.305	0.400	389
	1	14	0.100	0.600	0.300	320

(b) Primjer 2.

Slika B.1: Ulazne matrice

B.2 JMP

	X1	X2	X3	Y
1	0,5	0,5	0	15
2	0	1	0	8,8
3	0	0,5	0,5	9,7
4	0	1	0	10
5	0,5	0	0,5	17,7
6	1	0	0	11
7	0,5	0	0,5	16,4
8	0	0,5	0,5	10
9	1	0	0	12,4
10	0	0	1	16,8
11	0,5	0,5	0	14,8
12	0	0	1	16
13	0	0,5	0,5	11,8
14	0,5	0	0,5	16,6
15	0,5	0,5	0	16,1

(a) Primjer 1.

	X1	X2	X3	Y
1	0,3	0,6	0,1	313,5
2	0,57	0,23	0,2	351
3	0,27	0,48	0,25	356
4	0,1	0,6	0,3	304
5	0,4	0,1	0,5	356
6	0,8	0,1	0,1	288,5
7	0,8	0,1	0,1	331,5
8	0,4	0,1	0,5	382
9	0,1	0,4	0,5	412
10	0,3	0,6	0,1	325,5
11	0,445	0,355	0,2	376
12	0,6	0,1	0,3	362
13	0,295	0,305	0,4	389
14	0,1	0,6	0,3	320

(b) Primjer 2.

Slika B.2: Ulazne matrice

B.3 Minitab

↓	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8
	X1	X2	X3	Y	StdOrder	RunOrder	Blocks	PtType
1	0,5	0,5	0,0	15,0	1	1	1	1
2	0,0	1,0	0,0	8,8	2	2	1	1
3	0,0	0,5	0,5	9,7	3	3	1	1
4	0,0	1,0	0,0	10,0	4	4	1	1
5	0,5	0,0	0,5	17,7	5	5	1	1
6	1,0	0,0	0,0	11,0	6	6	1	1
7	0,5	0,0	0,5	16,4	7	7	1	1
8	0,0	0,5	0,5	10,0	8	8	1	1
9	1,0	0,0	0,0	12,4	9	9	1	1
10	0,0	0,0	1,0	16,8	10	10	1	1
11	0,5	0,5	0,0	14,8	11	11	1	1
12	0,0	0,0	1,0	16,0	12	12	1	1
13	0,0	0,5	0,5	11,8	13	13	1	1
14	0,5	0,0	0,5	16,6	14	14	1	1
15	0,5	0,5	0,0	16,1	15	15	1	1

(a) Primjer 1.

↓	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8
	X1	X2	X3	Y	StdOrder	RunOrder	Blocks	PtType
1	0,300	0,600	0,10	313,5	1	1	1	1
2	0,570	0,230	0,20	351,0	2	2	1	1
3	0,270	0,480	0,25	356,0	3	3	1	1
4	0,100	0,600	0,30	304,0	4	4	1	1
5	0,400	0,100	0,50	356,0	5	5	1	1
6	0,800	0,100	0,10	288,5	6	6	1	1
7	0,800	0,100	0,10	331,5	7	7	1	1
8	0,400	0,100	0,50	382,0	8	8	1	1
9	0,100	0,400	0,50	412,0	9	9	1	1
10	0,300	0,600	0,10	325,5	10	10	1	1
11	0,445	0,355	0,20	376,0	11	11	1	1
12	0,600	0,100	0,30	362,0	12	12	1	1
13	0,295	0,305	0,40	389,0	13	13	1	1
14	0,100	0,600	0,30	320,0	14	14	1	1

(b) Primjer 2.

Slika B.3: Ulazne matrice

Prilog C

Izlazni podaci za programske pakete

Prikazani su samo numerički izlazi pošto su grafički prikazani u poglavlju 3.2.

C.1 Design-Expert

Primjer 1.

Design Summary:

Design Summary

File Version 8.0.7.1

Study Type Mixture Runs 15

Design Type Simplex Lattice Blocks No Blocks

Design Model Quadratic Build Time (ms) 106.60

Component	Name	Units	Type	Minimum	Maximum	Coded	Values	Mean	Std. Dev.
A	A Mixture	0.000	1.000	0.000=0.000	1.000=1.000	0.333	0.350		
B	B Mixture	0.000	1.000	0.000=0.000	1.000=1.000	0.333	0.350		
C	C Mixture	0.000	1.000	0.000=0.000	1.000=1.000	0.333	0.350		
Total = 1.00 L_Pseudo Coding									

Response	Name	Units	Obs	Analysis	Minimum	Maximum	Mean	Std. Dev.	Ratio	Trans
Y1	R1	15	Polynomial	8.8	17.7	13.54	3.10364	2.01136	None	Quadratic

Results of Evaluation:

Results of Evaluation

3 Factors: A, B, C

Design Matrix Evaluation for Mixture Quadratic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

No aliases found for Quadratic Model

Aliases are calculated based on your response selection,
taking into account missing datapoints, if necessary.
Watch for aliases among terms you need to estimate.

Degrees of Freedom for Evaluation

Model	5
Residuals	9
Lack Of Fit	0
Pure Error	9
Corr Total	14

A recommendation is a minimum of 3 lack of fit df and 4 df for pure error.
This ensures a valid lack of fit test.
Fewer df will lead to a test that may not detect lack of fit.

Power at 5 % alpha level to detect signal/noise ratios of

Term	StdErr**	VIF	Ri-Squared	0.5 Std. Dev.	1 Std. Dev.	2 Std. Dev.
A	0.71	1.75	0.4286	8.1 %	17.9 %	54.0 %
B	0.71	1.75	0.4286	8.1 %	17.9 %	54.0 %
C	0.71	1.75	0.4286	8.1 %	17.9 %	54.0 %
AB	3.06	1.75	0.4286	9.0 %	21.6 %	64.6 %
AC	3.06	1.75	0.4286	9.0 %	21.6 %	64.6 %
BC	3.06	1.75	0.4286	9.0 %	21.6 %	64.6 %

**Basis Std. Dev. = 1.0

Measures Derived From the $(X'X)^{-1}$ Matrix

Std Leverage Point Type

1	0.3333	Unknown
2	0.5000	Unknown
3	0.3333	Unknown
4	0.3333	Unknown
5	0.5000	Unknown
6	0.3333	Unknown
7	0.3333	Unknown
8	0.3333	Unknown
9	0.5000	Unknown
10	0.5000	Unknown
11	0.3333	Unknown
12	0.3333	Unknown
13	0.5000	Unknown

14 0.3333 Unknown
 15 0.5000 Unknown
 Average = 0.4000

Watch for leverages close to 1.0. Consider replicating these points
 or make sure they are run very carefully.

Fit Summary:

Fit Summary of R1R1

Response 1 R1 Transform: None

*** WARNING: The Special Cubic Model and higher are Aliased! ***

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Summary (detailed tables shown below)

Sequential Lack of Fit Adjusted Predicted
 Source p-value p-value R-Squared R-Squared
 Linear 0.0353 < 0.0001 0.3319 0.1041
 Quadratic < 0.0001 0.9243 0.8643 Suggested
 Special Cubic Aliased

Sequential Model Sum of Squares [Type I]

Sum of Mean F p-value
 Source Squares df Square Value Prob > F
 Mean vs Total 2749.97 1 2749.97
 Linear vs Mean 57.63 2 28.81 4.48 0.0353
 Quadratic vs Linear 70.67 3 23.56 32.32 < 0.0001 Suggested
 Sp Cubic vs Quadratic 0.000 0 Aliased
 Residual 6.56 9 0.73
 Total 2884.83 15 192.32

+"Sequential Model Sum of Squares [Type I]"+: Select the highest order
 polynomial where the additional terms are significant and the model is
 not aliased.

Lack of Fit Tests

Sum of Mean F p-value
 Source Squares df Square Value Prob > F
 Linear 70.67 3 23.56 32.32 < 0.0001
 Quadratic 0.000 0 Suggested
 Special Cubic 0.000 0 Aliased
 Pure Error 6.56 9 0.73

+"Lack of Fit Tests"+: Want the selected model to have insignificant

lack-of-fit.

Model Summary Statistics
Std. Adjusted Predicted
Source Dev. R-Squared R-Squared R-Squared PRESS
Linear 2.54 0.4273 0.3319 0.1041 120.81
Quadratic 0.85 0.9514 0.9243 0.8643 18.30 Suggested
Special Cubic + Aliased

"Model Summary Statistics"+: Focus on the model maximizing the
"Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA:

Response 1 R1

ANOVA for Quadratic Mixture Model
*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***
Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]
Sum of Mean F p-value
Source Squares df Square Value Prob > F
Model 128.30 5 25.66 35.20 < 0.0001 significant
Linear Mixture 57.63 2 28.81 39.53 < 0.0001
AB 38.68 1 38.68 53.07 < 0.0001
AC 13.92 1 13.92 19.10 0.0018
BC 9.87 1 9.87 13.55 0.0051
Pure Error 6.56 9 0.73
Cor Total 134.86 14

The Model F-value of 35.20 implies the model is significant.
There is only a 0.01% chance that a "Model F-Value" this large
could occur due to noise.

Values of "Prob > F" less than 0.0500 indicate model terms are
significant. In this case Linear Mixture Components, AB, AC, BC
are significant model terms. Values greater than 0.1000 indicate
the model terms are not significant. If there are many insignificant
model terms (not counting those required to support hierarchy),
model reduction may improve your model.

Std. Dev. 0.85 R-Squared 0.9514
Mean 13.54 Adj R-Squared 0.9243
C.V. % 6.31 Pred R-Squared 0.8643
PRESS 18.30 Adeq Precision 13.890

The "Pred R-Squared" of 0.8643 is in reasonable agreement with
the "Adj R-Squared" of 0.9243.

"Adeq Precision" measures the signal to noise ratio. A ratio greater than 4 is desirable. Your ratio of 13.890 indicates an adequate signal. This model can be used to navigate the design space.

	Coefficient	Standard	95% CI	95% CI	
Component	Estimate	df	Error	Low	High
A-A	11.70	1	0.60	10.33	13.07
B-B	9.40	1	0.60	8.03	10.77
C-C	16.40	1	0.60	15.03	17.77
AB	19.00	1	2.61	13.10	24.90
AC	11.40	1	2.61	5.50	17.30
BC	-9.60	1	2.61	-15.50	-3.70

Final Equation in Terms of L_Pseudo Components:

R1 =
 +11.70 * A
 +9.40 * B
 +16.40 * C
 +19.00 * A * B
 +11.40 * A * C
 -9.60 * B * C

Final Equation in Terms of Real Components:

R1 =
 +11.70000 * A
 +9.40000 * B
 +16.40000 * C
 +19.00000 * A * B
 +11.40000 * A * C
 -9.60000 * B * C

Final Equation in Terms of Actual Components:

R1 =
 +11.70000 * A
 +9.40000 * B
 +16.40000 * C
 +19.00000 * A * B
 +11.40000 * A * C
 -9.60000 * B * C

Primjer 2.

Design Summary:

Design Summary

File Version 8.0.7.1
 Study Type Mixture Runs 14
 Design Type Simplex Lattice Blocks No Blocks
 Design Model Quadratic Build Time (ms) 106.60

Component	Name	Units	Type	Minimum	Maximum	Coded	Values	Mean	Std. Dev.
A	A Mixture	0.100	0.800	0.000=0.000	1.000=1.000	0.391	0.225		
B	B Mixture	0.100	0.600	0.000=0.000	1.000=1.000	0.334	0.206		
C	C Mixture	0.100	0.500	0.000=0.000	1.000=1.000	0.275	0.147		

Total = 1.00 L_Pseudo Coding

Response	Name	Units	Obs	Analysis	Minimum	Maximum	Mean	Std. Dev.	Ratio	Trans
Y1	R1	14	Polynomial	288.5	412	347.643	35.3849	1.42808	None	Quadratic

Model

Results of Evaluation:

3 Factors: A, B, C

Design Matrix Evaluation for Mixture Quadratic Model
 *** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

No aliases found for Quadratic Model

Aliases are calculated based on your response selection,
 taking into account missing datapoints, if necessary.
 Watch for aliases among terms you need to estimate.

Degrees of Freedom for Evaluation	
Model	5
Residuals	8
Lack Of Fit	4
Pure Error	4
Corr Total	13

A recommendation is a minimum of 3 lack of fit df and 4 df for pure error.
 This ensures a valid lack of fit test.
 Fewer df will lead to a test that may not detect lack of fit.

Power at 5 % alpha level to detect signal/noise ratios of
 Term StdErr** VIF Ri-Squared 0.5 Std. Dev. 1 Std. Dev. 2 Std. Dev.
 A 1.74 8.60 0.8838 5.2 % 5.6 % 7.4 %
 B 4.01 34.61 0.9711 5.1 % 5.3 % 6.4 %
 C 7.48 76.17 0.9869 5.0 % 5.2 % 5.7 %
 AB 11.14 19.87 0.9497 5.3 % 6.2 % 9.7 %
 AC 16.93 48.95 0.9796 5.1 % 5.5 % 7.0 %
 BC 16.92 44.24 0.9774 5.1 % 5.5 % 7.0 %
 **Basis Std. Dev. = 1.0

Measures Derived From the $(X'X)^{-1}$ Matrix

Std Leverage Point Type

1 0.4457 Unknown
 2 0.4678 Unknown
 3 0.4623 Unknown
 4 0.7657 Unknown
 5 0.2178 Unknown
 6 0.4726 Unknown
 7 0.4404 Unknown
 8 0.4457 Unknown
 9 0.4726 Unknown
 10 0.3593 Unknown
 11 0.4404 Unknown
 12 0.2796 Unknown
 13 0.2678 Unknown
 14 0.4623 Unknown
 Average = 0.4286

Watch for leverages close to 1.0. Consider replicating these points
 or make sure they are run very carefully.

Fit Summary:

Response 1 R1 Transform: None

*** WARNING: The Quartic Model is Aliased! ***

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Summary (detailed tables shown below)

Sequential Lack of Fit Adjusted Predicted
 Source p-value p-value R-Squared R-Squared
 Linear 0.0268 0.1751 0.3881 0.1438
 Quadratic 0.0175 0.6152 0.7471 0.3235 Suggested
 Special Cubic 0.3313 0.6160 0.7499 -0.0428
 Cubic 0.6160 0.7080
 Sp Quartic vs Quadratic 0.4252 0.7194 0.7577 -7.2426

Quartic vs Cubic 0.7080 Aliased
 Quartic vs Sp Quartic 0.7194 0.7080 Aliased

Sequential Model Sum of Squares [Type I]
 Sum of Mean F p-value
 Source Squares df Square Value Prob > F
 Mean vs Total 1.692E+006 1 1.692E+006
 Linear vs Mean 7850.11 2 3925.05 5.12 0.0268
 Quadratic vs Linear 5894.30 3 1964.77 6.21 0.0175 Suggested

Sp Cubic vs Quadratic 341.08 1 341.08 1.09 0.3313
 Cubic vs Sp Cubic 729.23 3 243.08 0.66 0.6160
 Quartic vs Cubic 0.000 0 Aliased
 Residual 1462.50 4 365.63

Sp Quartic vs Quadratic 1015.92 3 338.64 1.12 0.4252
 Quartic vs Sp Quartic 54.38 1 54.38 0.15 0.7194 Aliased
 Residual 1462.50 4 365.63
 Total 1.708E+006 14 1.220E+005

+"Sequential Model Sum of Squares [Type I]"+: Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests
 Sum of Mean F p-value
 Source Squares df Square Value Prob > F
 Linear 6964.61 7 994.94 2.72 0.1751
 Quadratic 1070.30 4 267.58 0.73 0.6152 Suggested
 Special Cubic 729.23 3 243.08 0.66 0.6160
 Cubic 0.000 0
 Special Quartic 54.38 1 54.38 0.15 0.7194
 Quartic 0.000 0 Aliased
 Pure Error 1462.50 4 365.63

+"Lack of Fit Tests"+: Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics
 Std. Adjusted Predicted
 Source Dev. R-Squared R-Squared R-Squared PRESS
 Linear 27.68 0.4823 0.3881 0.1438 13936.16
 Quadratic 17.79 0.8444 0.7471 0.3235 11011.87 Suggested
 Special Cubic 17.69 0.8653 0.7499 -0.0428 16973.51

Cubic 19.12 0.9102 0.7080 +
 Special Quartic 17.42 0.9068 0.7577 -7.2426 1.342E+005
 Quartic 19.12 0.9102 0.7080 + Aliased
 + Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"Model Summary Statistics"+: Focus on the model maximizing the
 "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA:

Response 1 R1

ANOVA for Quadratic Mixture Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Sum of Mean F p-value

Source Squares df Square Value Prob > F

Model 13744.41 5 2748.88 8.68 0.0043 significant

Linear Mixture 7850.11 2 3925.05 12.40 0.0035

AB 5875.62 1 5875.62 18.56 0.0026

AC 56.11 1 56.11 0.18 0.6848

BC 811.68 1 811.68 2.56 0.1480

Residual 2532.80 8 316.60

Lack of Fit 1070.30 4 267.58 0.73 0.6152 not significant

Pure Error 1462.50 4 365.63

Cor Total 16277.21 13

The Model F-value of 8.68 implies the model is significant. There is only a 0.43% chance that a "Model F-Value" this large could occur due to noise.

Values of "Prob > F" less than 0.0500 indicate model terms are significant. In this case Linear Mixture Components, AB are significant model terms. Values greater than 0.1000 indicate the model terms are not significant. If there are many insignificant model terms (not counting those required to support hierarchy), model reduction may improve your model.

The "Lack of Fit F-value" of 0.73 implies the Lack of Fit is not significant relative to the pure error. There is a 61.52% chance that a "Lack of Fit F-value" this large could occur due to noise. Non-significant lack of fit is good -- we want the model to fit.

Std. Dev. 17.79 R-Squared 0.8444

Mean 347.64 Adj R-Squared 0.7471

C.V. % 5.12 Pred R-Squared 0.3235

PRESS 11011.87 Adeq Precision 7.424

The "Pred R-Squared" of 0.3235 is not as close to the "Adj R-Squared" of 0.7471 as one might normally expect. This may indicate a large block effect or a possible problem with your model and/or data. Things to consider are model reduction, response transformation, outliers, etc.

"Adeq Precision" measures the signal to noise ratio. A ratio greater than 4 is desirable. Your ratio of 7.424 indicates an adequate signal. This model can be used to navigate the design space.

	Coefficient	Standard	95% CI	95% CI	
Component	Estimate	df	Error	Low	High VIF
A-A	248.85	1	30.90	177.59	320.10 8.60
B-B	23.11	1	71.35	-141.43	187.65 34.61
C-C	481.23	1	133.04	174.43	788.02 76.17
AB	853.68	1	198.16	396.71	1310.65 19.87
AC	-126.86	1	301.32	-821.70	567.99 48.95
BC	482.04	1	301.06	-212.20	1176.28 44.24

Final Equation in Terms of L_Pseudo Components:

$$\begin{aligned}
 R1 = & \\
 & +248.85 * A \\
 & +23.11 * B \\
 & +481.23 * C \\
 & +853.68 * A * B \\
 & -126.86 * A * C \\
 & +482.04 * B * C
 \end{aligned}$$

Final Equation in Terms of Real Components:

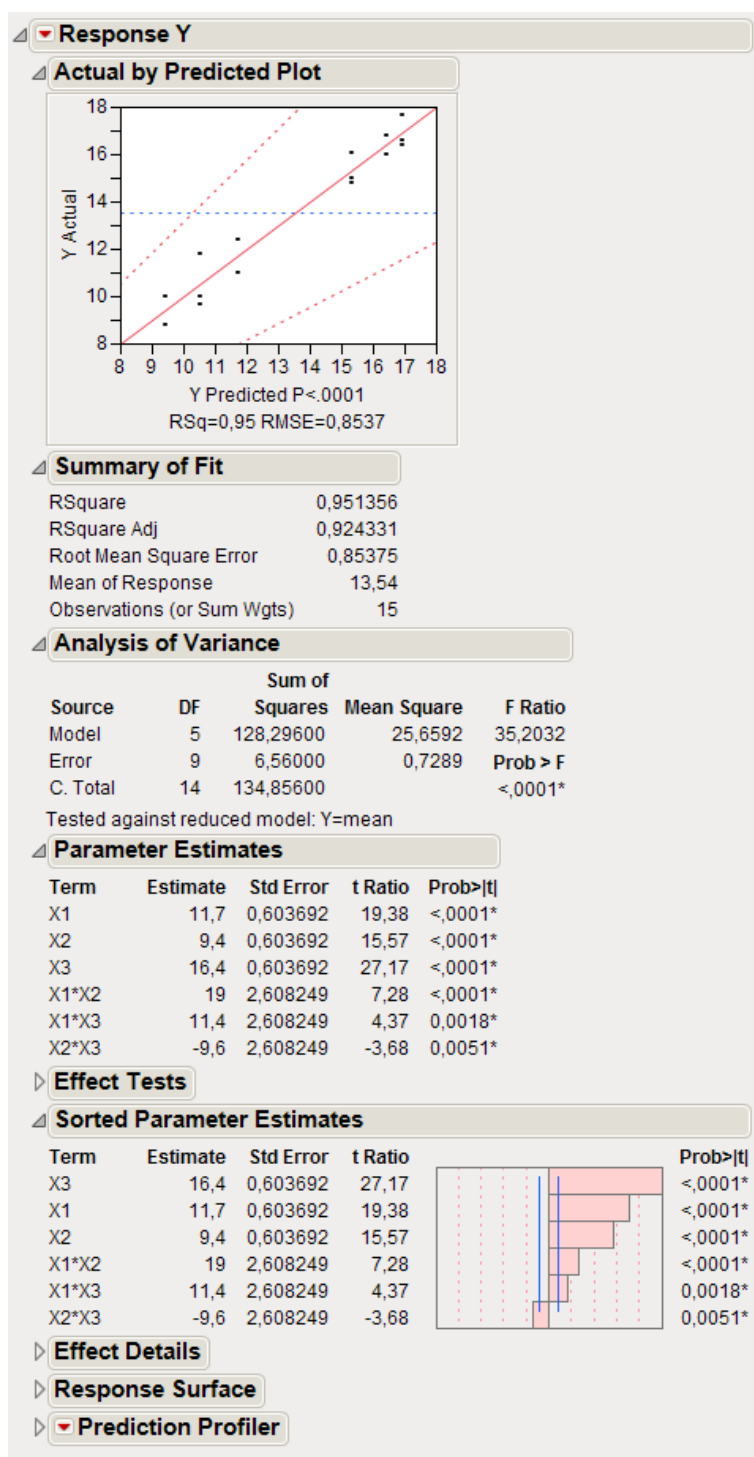
$$\begin{aligned}
 R1 = & \\
 & +248.84889 * A \\
 & +23.10962 * B \\
 & +481.22540 * C \\
 & +853.67927 * A * B \\
 & -126.85544 * A * C \\
 & +482.04302 * B * C
 \end{aligned}$$

Final Equation in Terms of Actual Components:

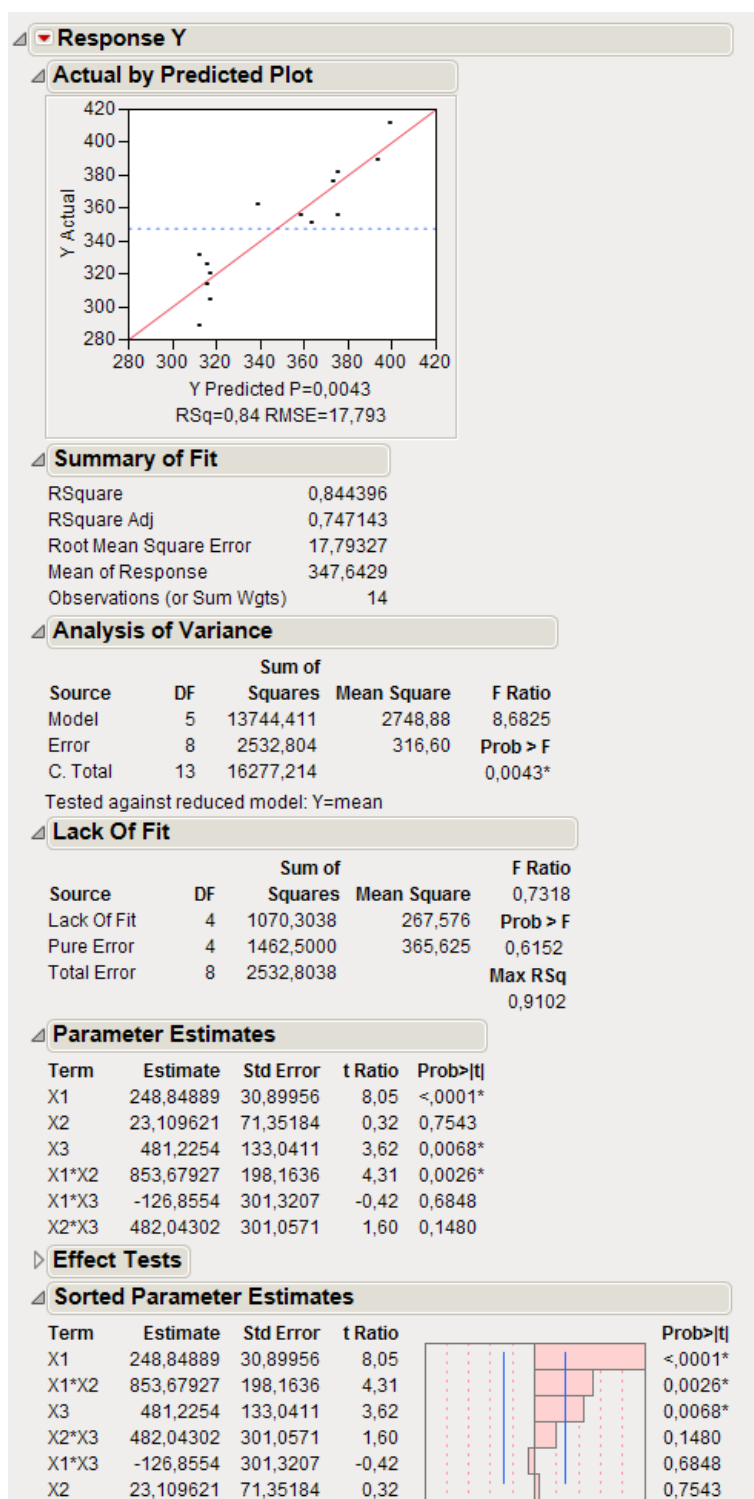
$$\begin{aligned}
 R1 = & \\
 & +248.84889 * A \\
 & +23.10962 * B \\
 & +481.22540 * C \\
 & +853.67927 * A * B
 \end{aligned}$$

-126.85544 * A * C
+482.04302 * B * C

C.2 JMP



Slika C.1: Izlazni podaci za primjer 1.



Slika C.2: Izlazni podaci za primjer 2.

C.3 Minitab

Primjer 1.

Regression for Mixtures: Y versus X1; X2; X3

Estimated Regression Coefficients for Y (component proportions)

Term	Coef	SE Coef	T	P	VIF
X1	11,700	0,6037	*	*	1,750
X2	9,400	0,6037	*	*	1,750
X3	16,400	0,6037	*	*	1,750
X1*X2	19,000	2,6082	7,28	0,000	1,750
X1*X3	11,400	2,6082	4,37	0,002	1,750
X2*X3	-9,600	2,6082	-3,68	0,005	1,750

S = 0,853750 PRESS = 18,295

R-Sq = 95,14% R-Sq(pred) = 86,43% R-Sq(adj) = 92,43%

Analysis of Variance for Y (component proportions)

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	5	128,296	128,2960	25,6592	35,20	0,000
Linear	2	57,629	50,9200	25,4600	34,93	0,000
Quadratic	3	70,667	70,6669	23,5556	32,32	0,000
X1*X2	1	40,456	38,6786	38,6786	53,07	0,000
X1*X3	1	20,337	13,9243	13,9243	19,10	0,002
X2*X3	1	9,874	9,8743	9,8743	13,55	0,005
Residual Error	9	6,560	6,5600	0,7289		
Total	14	134,856				

Primjer 2.

Regression for Mixtures: Y versus X1; X2; X3

Estimated Regression Coefficients for Y (component proportions)

Term	Coef	SE Coef	T	P	VIF
X1	248,8	30,90	*	*	8,603
X2	23,1	71,35	*	*	34,611
X3	481,2	133,04	*	*	76,172
X1*X2	853,7	198,16	4,31	0,003	19,874
X1*X3	-126,9	301,32	-0,42	0,685	48,952
X2*X3	482,0	301,06	1,60	0,148	44,242

S = 17,7933 PRESS = 11011,9
R-Sq = 84,44% R-Sq(pred) = 32,35% R-Sq(adj) = 74,71%

Analysis of Variance for Y (component proportions)

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	5	13744,4	13744,41	2748,88	8,68	0,004
Linear	2	7850,1	4626,88	2313,44	7,31	0,016
Quadratic	3	5894,3	5894,30	1964,77	6,21	0,017
X1*X2	1	3566,9	5875,62	5875,62	18,56	0,003
X1*X3	1	1515,7	56,11	56,11	0,18	0,685
X2*X3	1	811,7	811,68	811,68	2,56	0,148
Residual Error	8	2532,8	2532,80	316,60		
Lack-of-Fit	4	1070,3	1070,30	267,58	0,73	0,615
Pure Error	4	1462,5	1462,50	365,63		
Total	13	16277,2				